

15793  
7. FOLGE, 1959, BAND 5, HEFT 7-8

LIBRARY  
OF MICHIGAN  
SEP 1  
1959

# ANNALEN DER PHYSIK

Gegründet 1799 durch F. A. C. Gren  
Fortgeführt durch L. W. Gilbert, J. C. Poggendorff,  
G. und E. Wiedemann, P. Drude, W. Wien,  
M. Planck, E. Grüneisen, F. Möglich

Der ganzen Reihe 458. Band

#### Kuratorium:

W. GENTNER, W. GERLACH, F. HUND, B. KOCKEL,  
M. v. LAUE, W. MEISSNER, W. PAUL, R. W. POHL,  
R. ROMPE, R. SEELIGER, W. WEIZEL

Herausgegeben von

H. KOPFERMANN      G. RICHTER  
Heidelberg            Berlin



JOHANN AMBROSIUS BARTH / VERLAG / LEIPZIG

Redaktionsschluß am 2. Juli 1959

## Inhalt

H. A. Buchdahl, Tasmania (Australia): Über Approximationen der Zustandsgleichung eines Fermi-Dirac-Gases .....	345
T. I. Kakuschadse, Tbilissi: Die Satelliten $K\alpha_3$ und $K\beta'$ der Linien des Röntgenspektrums. Mit 6 Abbildungen .....	352
A. Papapetrou und H. Treder, Berlin: Zur Frage der Existenz von singularitätsfreien Lösungen der allgemein-relativistischen Feldgleichungen, die Teilchenmodelle darstellen könnten. Mit 4 Abbildungen .....	360
H. Morgenroth, Berlin: Über die Elektrophorese in Argon-Quecksilber-Niederdruckentladungen. Mit 16 Abbildungen .....	373
H. Flietner, Berlin-Adlershof: Oberflächenleitfähigkeit unter Berücksichtigung der Streuung der Ladungsträger an der Oberfläche bei kleinen Bandverbindungen. Mit 15 Abbildungen .....	396
H. Flietner, Berlin-Adlershof: Feldeffekt und Reaktionen an der Oberfläche von Germanium. Mit 11 Abbildungen .....	414
W. Ermisch und R. Seiwert, Berlin: Berichtigung zur Arbeit: „Die Depolarisation der Natrium-Resonanzfluoreszenz“. Ann. Physik (7) 2, 393 (1959) .....	427

Für diese Zeitschrift werden grundsätzlich nur Arbeiten angenommen, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung geht das alleinige Recht der Vervielfältigung, Verbreitung und Übersetzung einschließlich des Rechts der Veranstaltung von Sonderdrucken auf den Verlag über. Von jeder Arbeit liefert der Verlag 75 Sonderabzüge kostenlos.

Einsendung der Manuskripte erbeten an:

Prof. Dr. H. Kopfermann, Heidelberg, Albert-Ueberle-Straße 7,  
Prof. Dr. G. Richter, Zeuthen-Miersdorf, Platanenallee 6.

Die Redaktion bittet, die Manuskripte *druckfertig* einzuliefern und in den Korrekturen den bisherigen Raum des Textes nicht zu überschreiten. Die *Zeichnungen* sind in sorgfältiger Ausführung auf besonderen Blättern beizulegen.

Bei den *Zitaten* wolle man die Abkürzungen der Zeitschriftentitel nach dem Verzeichnis wählen, das jedem Jahrgang der „Physikalischen Berichte“ vorangestellt ist.

Die Zeitschrift erscheint in Bänden mit 8 Heften, die zwangslässig ausgegeben werden. Die Lieferung erfolgt durch den Sortimentsbuchhandel, in Ausnahmefällen unmittelbar vom Verlag. Der Bezugspreis beträgt je Band 34.— zuzüglich Postgebühren (U. S. \$ 8.57 einschließlich Porto).

Die Lieferung erfolgt bis zur Abbestellung, die nur für das Ende eines Bandes ausgesprochen werden kann.

# ANNALEN DER PHYSIK

7. FOLGE \* BAND 3, HEFT 7-8 \* 1959

345

352

## Über Approximationen der Zustandsgleichung eines Fermi-Dirac-Gases

Von H. A. Buchdahl

360

### Inhaltsübersicht

Von gewissen Reihenentwicklungen ausgehend werden elementare Approximationen in geschlossener Form erhalten für die Zustandsgleichung eines idealen Fermi-Dirac-Gases bei beliebigem Grad der Entartung, ohne von irgendwelchen numerisch berechneten Werten Gebrauch zu machen. Hierbei wird verlangt, daß jede zulässige Approximation in den beiden Extremfällen, nämlich der fast vollkommenen Entartung bzw. Nichtentartung, nicht nur den Druck des Gases, sondern auch seine spezifische Wärme richtig wiedergeben soll. Gewisse Ergebnisse werden tabellarisch mit bekannten Werten verglichen.

### 1. Einleitung

In einer früheren Arbeit<sup>1)</sup> habe ich Approximationen der Thomas-Fermi-Funktion  $y(x)$ , ( $0 \leq x < \infty$ ), in geschlossener Form betrachtet. Die Untersuchung ging von den bekannten Eigenschaften

$$y(0) = 1, \quad y(x) \sim 144 x^{-3} \quad (x \rightarrow \infty) \quad (1)$$

aus. Weiterhin wurden auch auf rein numerischen Wege berechnete Funktionswerte hinzugezogen. Nun ist es möglich, die damals verwendete Methode auch auf andere der in der theoretischen Physik vorkommenden transzentalen Funktionen erfolgreich auszudehnen. In anderen Worten, ist  $f(x)$  eine solche Funktion, so versucht man einfache algebraische Funktionen  $g(x)$  zu finden, welche  $f(x)$  über den ganzen Definitionsbereich  $x_0 \leq x \leq x_1$  genügend genau approximieren, wobei von etwa bekannten Reihenentwicklungen von  $f(x)$  in der Nähe von  $x_0$  und  $x_1$  — mögen sie absolut oder nur asymptotisch konvergieren — Gebrauch zu machen ist. Unter Umständen kommt man dann sogar ganz ohne irgendwelche numerische Behandlungen aus.

In der vorliegenden Arbeit möchte ich nun gerade ein solches Beispiel betrachten, und zwar handelt es sich um die Zustandsgleichung eines idealen nicht-relativistischen Fermi-Dirac-Gases für beliebigen Grad der Entartung. Es wird angenommen, daß dasselbe aus  $N$  gleichen Teilchen besteht, von denen jedes die Masse  $m$  und den Spin  $\frac{1}{2}$  besitzt. Es sei  $P$  der Druck des Gases,  $T$  seine absolute Temperatur und  $V$  sein Volumen, also  $n = N/V$  die Teilchen-dichte. Dann kann man immer die Zustandsgleichung in der Form

$$P = n k T f(x) \quad (2)$$

<sup>1)</sup> H. A. Buchdahl, Ann. Physik 17, 238 (1956).

anschreiben ( $k = \text{Boltzmannsche Konstante}$ ), wobei  $x$  zu  $n T^{-1/2}$  proportional ist, wie aus dem Virialsatz und den allgemeinen Prinzipien der Thermodynamik leicht folgt. Es wird nun eine elementare Approximation  $g(x)$ , für die Funktion  $f(x)$  gesucht. Die Anforderungen, die dabei an  $g(x)$  zu stellen sind, werden weiter unten im vierten Abschnitt erörtert. Zuerst sollen die genauen Gleichungen, welche die Grundlage der gegenwärtigen Untersuchung bilden, kurz zusammengestellt werden.

Es soll noch bemerkt werden, daß die spezifische Wärme bei konstantem Volumen (pro Teilchen) allgemein durch die Formel

$$c(x) = \frac{3}{2} \left( f - \frac{3}{2} x \frac{\partial f}{\partial x} \right) \quad (3)$$

gegeben ist.

## 2. Die Grundgleichungen

Man definiere  $\varepsilon^*$  durch die Aussage, daß die Anzahl der Quantenzustände mit Energie  $<\varepsilon^*$  gerade  $N$  ist. Dann zeigen z. B. Fowler u. Guggenheim<sup>2)</sup>, daß  $P$  durch das Integral

$$P = n k T (k T / \varepsilon^*)^{1/2} \int_0^\infty \frac{t^{1/2} dt}{1 + e^{t-y}} \quad (4)$$

gegeben ist, wobei sich der Parameter  $y$  aus der Beziehung

$$\frac{3}{2} (k T / \varepsilon^*)^{1/2} \int_0^\infty \frac{t^{1/2} dt}{1 + e^{t-y}} = 1 \quad (5)$$

berechnet. Ferner ist die Energie des Gases

$$U = \frac{3}{2} P V, \quad (6)$$

während  $\varepsilon^*$  mit  $n$  durch

$$\varepsilon^* = \frac{\hbar^2}{8m} \left( \frac{3n}{\pi} \right)^{1/2} \quad (7)$$

verbunden ist, wobei  $\hbar$  die Plancksche Konstante ist. Schreibt man

$$F(y) = \int_0^\infty \frac{t^{1/2} dt}{1 + e^{t-y}}, \quad G(y) = \frac{2}{3} \int_0^\infty \frac{t^{1/2} dt}{1 + e^{t-y}}, \quad (8)$$

(und das sind gerade die von McDougall und Stoner<sup>3)</sup> auf numerischem Wege berechneten Funktionen), so kann man auch schreiben

$$P = n k T G(y) / F(y), \quad (9)$$

wobei  $y$  durch

$$F(y) = \frac{2}{3} (\varepsilon^* / k T)^{1/2} \quad (10)$$

<sup>2)</sup> R. H. Fowler u. E. A. Guggenheim, Statistical Thermodynamics, Cambridge University Press, 1939, Kap. 11.

<sup>3)</sup> J. McDougall u. E. C. Stoner, Philos. Trans. Roy. Soc. London, (A) 237, 67 (1938).

gegeben ist. Schließlich erhält man aus (6), (9), und (10) die der Gl. (3) entsprechende Formel

$$c = \frac{3}{4} (5 G/F - 3 F/F'), \quad (11)$$

mit  $F' = \partial F / \partial y$ .

### 3. Reihenentwicklungen

Die folgenden Entwicklungen sind bekannt<sup>3)</sup>. Für  $y \leq 0$  hat man die folgenden Reihen, welche für  $y < 0$  absolut konvergieren:

$$F(y) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} e^y (1 - 2^{-1/2} e^y + 3^{-1/2} e^{2y} + 0(e^{3y})), \quad (12)$$

$$G(y) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} e^y (1 - 2^{-1/2} e^y + 3^{-1/2} e^{2y} + 0(e^{3y})). \quad (13)$$

Andererseits hat man für genügend große positive  $y$  ( $y \rightarrow \infty$ ) die asymptotischen Reihen

$$F(y) \sim \frac{2}{3} y^{1/2} \left( 1 + \frac{\pi^2}{8} y^{-2} + \frac{7\pi^4}{640} y^{-4} + \dots \right), \quad (14)$$

$$G(y) \sim \frac{4}{15} y^{1/2} \left( 1 + \frac{5\pi^2}{8} y^{-2} - \frac{7\pi^4}{384} y^{-4} + \dots \right). \quad (15)$$

Für große  $T$ , also  $y \rightarrow -\infty$ , ergibt (9) dann natürlich sofort die klassische Zustandsgleichung  $P = n k T$ . Schreibt man jetzt

$$F(y) = x, \text{ oder umgekehrt } y = q(x), \quad (16)$$

so kann man oben überall  $y$  durch  $x$  ausdrücken, und erhält dann schließlich auf diese Weise die gewünschte Funktion

$$f(x) = G(q(x))/F(q(x)) = x^{-1} G(q(x)). \quad (17)$$

Explizit ausgeschrieben hat man also wegen (12) und (14) für genügend kleine positive  $x$

$$e^y = e^{q(x)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} x \left[ 1 + \frac{1}{\sqrt{2}\pi} x + \frac{1}{\pi} \left( 1 - \frac{4}{3\sqrt{3}} \right) x^3 + 0(x^3) \right], \quad (18)$$

und für  $x \rightarrow \infty$

$$y = q(x) \sim \left( \frac{3}{2} x \right)^{1/2} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{3}{2} x \right)^{-1/2} - \frac{\pi^4}{80} \left( \frac{3}{2} x \right)^{-3/2} + \dots \right]. \quad (19)$$

Endlich ist also

$$f(x) \begin{cases} = 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{x}{\sqrt{2}\pi} \right) - \left( \frac{16}{9\sqrt{3}} - 1 \right) \left( \frac{x}{\sqrt{2}\pi} \right)^3 + 0(x^3), & (x \rightarrow 0) \\ \sim \frac{2}{5} \left( \frac{3}{2} x \right)^{1/2} \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{3}{2} x \right)^{-1/2} - \frac{\pi^4}{16} \left( \frac{3}{2} x \right)^{-3/2} + \dots \right], & (x \rightarrow \infty). \end{cases} \quad (20)$$

$$f(x) \sim \frac{2}{5} \left( \frac{3}{2} x \right)^{1/2} \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{3}{2} x \right)^{-1/2} - \frac{\pi^4}{16} \left( \frac{3}{2} x \right)^{-3/2} + \dots \right], \quad (x \rightarrow \infty). \quad (21)$$

Hierbei ist  $x$  natürlich durch (10) gegeben, d. h.

$$x = \frac{\hbar^3}{4\pi(2m)^{1/2}} n T^{-1/2}. \quad (22)$$

Ähnliche Reihenentwicklungen sind schon z. B. von Stoner<sup>4)</sup> aufgestellt worden. Er hat aber dann nur  $U$  und  $c$  direkt aus ihnen berechnet.

<sup>4)</sup> E. C. Stoner, Philos. Mag. 21, 145 (1936).

#### 4. Über Forderungen an die Güte der Approximation

Die Funktion  $f(x)$ , deren Reihenentwicklungen in der Nähe der unteren und oberen Grenzen des betrachteten Gebietes durch (20) und (21) gegeben sind, ist diejenige, deren Approximation  $g(x)$  nun gesucht wird. Es entsteht jetzt die Frage, welche Forderungen man jetzt im Prinzip an die Güte einer solchen Approximation stellen soll. Betrachtet man nämlich etwa die Funktion

$$g(x) = 1 + \frac{2}{5} \left( \frac{3x}{2} \right)^{2/3}, \quad (23)$$

so ist zwar  $g(0) = 1$  und  $g(x) \sim \frac{2}{5} \left( \frac{3x}{2} \right)^{2/3}$ , wenn  $x \rightarrow \infty$ ; d. h. (23) verletzt nicht die Gesetze der klassischen Thermodynamik, und steht im Einklang mit den Extremfällen, in welchen das Gas überhaupt nicht bzw. vollkommen entartet ist. Es ist aber weder die Zustandsgleichung des schwach entarteten Gases noch die spezifische Wärme des fast vollkommen entarteten Gases durch (23) richtig wiedergegeben. Es soll also verlangt werden, daß  $g(x)$  sowohl das schwach entartete Gas als auch das stark entartete Gas samt seiner spezifischen Wärme in erster Näherung genau richtig beschreiben soll, während es gleichzeitig für beliebigen Grad der Entartung den Gasdruck mit nur geringem Fehler darstellen soll. Um diesen Anforderungen gerecht werden zu können, muß man also schon Funktionen betrachten, die mindestens jeweils die zwei ersten Glieder von (20) und (21) genau wiedergeben. Eine solche Funktion  $g(x)$  muß also mindestens drei verfügbare Konstanten enthalten, wenn schon vorausgesetzt ist, daß  $g(0) = 1$  ist. Dabei soll hier versucht werden mit den obigen Entwicklungen allein auszukommen, d. h. ohne irgendwelche Zahlentabellen zu benutzen.

Am naheliegendsten ist wohl eine Funktion der Form

$$g(x) = (1 + a x + b x^{2(n-2)/3} + c x^{2n/3})^{1/n} \quad \left( n > \frac{7}{2} \right), \quad (24)$$

wobei  $n$  einen möglichst ungekünstelten Wert besitzen soll. Hat man  $n$  einmal gewählt, dann kann man dann die drei Konstanten  $a, b, c$  so bestimmen, daß jeweils die gewünschten Glieder von (20) und (21) genau wiedergegeben werden. Faßt man nun jeweils die dritten Glieder ins Auge, ohne sich dabei um deren konstante Faktoren zu kümmern, und verlangt ihre richtige Abhängigkeit von  $x$ , so müßte einmal  $n = 5$  und das andere Mal  $n = 11/2$  sein. Diese Werte sind sich glücklicherweise verhältnismäßig ähnlich. Nimmt man nun  $n = 5$ , so haben die dritten Glieder der Reihen, die aus (24) entspringen, das falsche Vorzeichen, d. h. man könnte erwarten, daß überall  $g(x) > f(x)$  ist. Andererseits, mit  $n = 11/2$  findet man, daß die in Frage kommenden Glieder zwar das richtige Vorzeichen haben, die Absolutbeträge ihrer konstanten Koeffizienten aber zu groß sind. In diesem Fall kann man also wohl überall  $f(x) > g(x)$  erwarten. Ein recht günstiger Wert von  $n$  wäre also vielleicht der Durchschnittswert von 5 und 11/2, also  $n = 21/4$ ; und es ist dann zu erwarten, daß  $g(x) - f(x)$  teilweise positiv und teilweise negativ ausfallen wird. Für  $n = 21/4$  ist die Approximation natürlich etwas „gekünstelter“ als für  $n = 5$ . Ich will aber aus heuristischen Gründen doch beide Fälle untersuchen.

5. Die Approximation  $n = 5$ Für  $f(x)$  hat man nun die Approximation

$$g(x) = (1 + a x + b x^2 + c x^{10/3})^{1/4}. \quad (25)$$

Werden jetzt die Koeffizienten  $a, b, c$  auf die oben auseinandergesetzte Weise bestimmt, so erhält man

$$a = \frac{5}{2\sqrt{2\pi}} = 0,997356,$$

$$b = \frac{6\pi^2}{125} = 0,473741,$$

$$c = \frac{108}{3125} \left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} = 0,0395613.$$

Mit (25) wird (3) zu

$$c(x) (= c^{(0)}) = \left(\frac{3}{2} + \frac{21}{20}a x + \frac{3}{5}b x^2\right) g^{-4}. \quad (26)$$

Tabelle 1

$y$	$x$	$g(x)$	$f(x)$	$\delta$ (%)	$c^{(0)}$	$c^{(1)}$	$\delta'$ (%)
-4	,016128	1,0032	1,0032	0	1,498	1,497	—
-3	,043366	1,0087	1,0087	0	1,493	1,494	—
-2	,11456	1,0230	1,0228	,02	1,482	1,484	—,1
-1	,29050	1,0588	1,0576	,11	1,455	1,458	—,2
0	,67809	1,1376	1,1334	,37	1,398	1,404	—,5
1	1,3964	1,2801	1,2708	,73	1,310	1,314	—,3
2	2,5025	1,4884	1,4752	,90	1,202	1,193	,8
3	3,9770	1,7498	1,7356	,82	1,084	1,061	2,2
4	5,7707	2,0496	2,0365	,66	,9639	,9341	3,2
5	7,8380	2,3762	2,3648	,49	,8522	,8210	3,8
6	10,144	2,7214	2,7116	,36	,7565	,725	4,2
7	12,665	3,0795	3,0711	,27	,6711	,644	4,2
8	15,380	3,4466	3,4395	,21	,6013	,576	4,3
9	18,278	3,8203	3,8143	,16	,5427	,521	4,2
10	21,344	4,1989	4,1938	,12	,4933	,474	4,0
11	24,572	4,5812	4,5767	,10	,4515	,434	4,1
12	27,952	4,9663	4,9624	,08	,4157	,400	4,0
13	31,477	5,3536	5,3502	,06	,3848	,371	3,8
14	35,143	5,7426	5,7397	,05	,3580	,345	3,8
15	38,943	6,1331	6,1305	,04	,3346	,323	3,7
16	42,873	6,5248	6,5225	,04	,3139	,303	3,6
17	46,929	6,9174	6,9154	,03	,2955	,286	3,5
18	51,106	7,3109	7,3090	,03	,2791	,271	3
19	55,402	7,7050	7,7034	,02	,2644	,257	3
20	59,813	8,0997	8,0983	,02	,2512	,244	3

In der Tab. 1 sind die aus (25) und (26) berechneten Werte von  $g$  und  $c$  zusammengestellt für den Intervall  $0,016 < x < 60$ , d. h.  $-4 \leq y \leq +20$ , und mit aus den Tafeln von McDougall und Stoner<sup>3)</sup> berechneten Werten von  $f(x)$  und  $c (= c^{(0)})$  verglichen<sup>4)</sup>. Man sieht, daß wie erwartet wurde  $g - f$  überall positiv ist. Die prozentuelle Differenz  $\delta$  hat einen Höchstwert,

<sup>3)</sup> Für  $y > 5$  ist  $c$  aus ihnen nur mit dreistelliger Genauigkeit berechenbar.

der unter eins liegt. Für  $c$  ist die prozentuelle Differenz  $\delta'$  zuerst negativ, und wächst dann bis auf ungefähr  $+4$  an. Leider fällt danach  $\delta'$  nur recht langsam ab.

### 6. Die Approximation $n = 21/4$

Es ist jetzt

$$g(x) = (1 + a x + b x^{19/4} + c x^{7/4})^{1/11}, \quad (27)$$

mit

$$a = \frac{21}{8\sqrt{2\pi}} = 1,04722,$$

$$b = \frac{63\pi^2}{1250} \left(\frac{18}{125}\right)^{1/11} = 0,423247,$$

$$c = \frac{108}{2125} \left(\frac{9}{10}\right)^{1/4} = 0,0336616.$$

Weiterhin ist

$$c(x) = \left(\frac{3}{2} + \frac{15}{14}a x + \frac{4}{7}b x^{19/4}\right) g^{-17/4}. \quad (28)$$

Tabelle 2

$y$	$x$	$g(x)$	$f(x)$	$\delta$ (%)	$c^{(g)}$	$c^{(f)}$	$\delta'$ (%)
-4	0,16128	1,0032	1,0032	—	1,498	1,497	—
-3	0,43366	1,0086	1,0087	—	1,494	1,494	—
-2	,11456	1,0225	1,0228	-,03	1,484	1,484	—
-1	,29050	1,0564	1,0576	-,11	1,459	1,458	—
0	,67809	1,1302	1,1334	-,28	1,406	1,404	—
1	1,3964	1,2655	1,2708	-,41	1,310	1,314	-,3
2	2,5025	1,4695	1,4752	-,39	1,183	1,193	-,8
3	3,9770	1,7308	1,7356	-,28	1,047	1,061	-,1,3
4	5,7707	2,0329	2,0365	-,17	,9199	,9341	-,1,5
5	7,8380	2,3624	2,3648	-,10	,8088	,8210	-,1,5
6	10,144	2,7102	2,7116	-,05	,7150	,725	-,1,4
7	12,665	3,0704	3,0711	-,02	,6369	,644	-,1,1
8	15,380	3,4393	3,4395	—	,5720	,576	-,1,0
9	18,278	3,8143	3,8143	—	,5177	,521	-,0,6
10	21,344	4,1939	4,1938	—	,4720	,474	—
11	24,572	4,5770	4,5767	—	,4332	,434	—
12	27,952	4,9627	4,9624	—	,3999	,400	—
13	31,477	5,3505	5,3502	—	,3712	,371	—
14	35,143	5,7400	5,7397	—	,3461	,345	—
15	38,943	6,1308	6,1305	—	,3240	,323	—
16	42,873	6,5228	6,5225	—	,3046	,303	—
17	46,929	6,9157	6,9154	—	,2873	,286	—
18	51,106	7,3093	7,3090	—	,2718	,271	—
19	55,042	7,7036	7,7034	—	,2579	,257	—
20	59,813	8,0985	8,0983	—	,2452	,244	—

In Tab. 2 werden genau wie in Tab. 1 die aus (27) und (28) berechneten Werte mit den aus den Tabellen entnommenen verglichen. Differenzen, welche durch Unsicherheiten in der letzten Stelle mehr oder weniger ihren Sinn verlieren, sind durch Striche ersetzt worden.

Wie erwartet wurde, ist diese Approximation bedeutend besser als die durch die Wahl  $n = 5$  bedingte.  $\delta$  wechselt jetzt tatsächlich das Vorzeichen; be-



T. I.

## Die $K\alpha_3$ und $K\beta'$ der Linien des Röntgenspektrums

Von T. I. Kakuschadse

Mit 6 Abbildungen

### Inhaltsübersicht

Mit Hilfe der Störungstheorie gelang es F. Bloch<sup>1)</sup>, das Entstehen des  $K\alpha_3$ -Satelliten der  $K\alpha_1$ -Linie zu deuten. Dieser Theorie von Bloch widerspricht jedoch das Fehlen eines analogen Satelliten bei der Linie  $K\beta_1$ , sowie das Vorhandensein eines sehr intensiven Satelliten  $K\beta'$ .

Eine Berücksichtigung der effektiven Wechselwirkung der Elektronen mit den Wärmeschwingungen des Gitters<sup>2)</sup> erweitert die Anwendbarkeit der Blochschen Theorie und erlaubt von einem einheitlichen Standpunkt aus nicht nur die Bildung der Satelliten  $K\alpha_3$  und  $K\beta'$ , sondern auch das Erscheinen einer Asymmetrie der  $K\alpha_1$ - und  $K\alpha_2$ -Linien zu erklären.

Zur Untersuchung der gestellten Aufgabe benutzen wir folgende fünf Voraussetzungen.

1. Die relative Wahrscheinlichkeit des Entstehens eines Satelliten durch doppelten Übergang ist durch die Formel

$$W = W_1 \cdot W_2 \quad (1)$$

gegeben; wobei  $W_1$  – die relative Wahrscheinlichkeit der Anregung des Atoms zur Ausstrahlung des Satelliten und  $W_2$  – die relative Wahrscheinlichkeit des gleichzeitigen doppelten Übergangs der Elektronen, die an der Bildung des Satelliten teilnehmen, ist (Abb. 1).

2. Nach der Theorie des doppelten Überganges entsteht ein kurzwelliger Satellit, wenn gleichzeitig mit dem Übergang, der der erzeugenden Linie entspricht, ein Übergang eines äußeren Elektrons auf ein tieferes Niveau stattfindet. Nach der Quantenstrahlungstheorie<sup>3)</sup> erhielt in diesem Falle Bloch<sup>1)</sup> für die relative Wahrscheinlichkeit  $W_2$  des gleichzeitigen doppelten Elektronenüberganges den angenäherten Ausdruck:

$$W_2 \sim \frac{e^2}{(E_a - E_b)^2} \left( \frac{r_1^2}{r_2^2} \right)^2. \quad (2)$$

<sup>1)</sup> F. Bloch, Physic. Rev. **48**, 187 (1935).

<sup>2)</sup> T. I. Kakuschadse, Übergangsmetalle und Legierungen, Tbilissi 1957; N. S. Akulow u. T. I. Kakuschadse, DAH CCCC 77, 593 (1951).

<sup>3)</sup> L. L. Schiff, Quantum Mechanic, New York 1955.

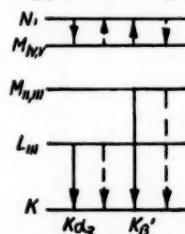


Abb. 1. Schematische Darstellung der Entstehung von Satelliten: Ausgezogene Pfeile – beobachtbare Satelliten, punktierte Pfeile – nicht beobachtbare Satelliten

Hier sind  $r_1$  und  $r_2$  die Radien der inneren und äußeren Bahnen im zweifach ionisierten Atom des Elementes mit der Ordnungszahl  $Z + 1$ ;  $E_a - E_b$  ist die Energie der Verschiebung des Satelliten von seiner erzeugenden Linie.

3. Nach der Theorie des doppelten Überganges entsteht ein langwelliger Satellit, wenn gleichzeitig mit dem Übergang, der der erzeugenden Linie entspricht, ein Sprung eines äußeren Elektrons auf ein noch höheres Niveau stattfindet. In diesem Falle ist die relative Wahrscheinlichkeit  $W_2$  dafür, daß beim Übergang des ersten Elektrons aus dem Zustand mit der Wellenfunktion  $\psi'(1)$  in den Zustand  $\psi''(1)$  (erzeugende Linie), ein zweites Elektron aus dem Zustand  $\psi'(2)$  in den Zustand  $\psi''(2)$  angeregt wird, proportional dem Quadrat des Matrixelementes<sup>4)</sup>

$$P = \int \frac{\varrho_1 \varrho_2 d\tau_1 d\tau_2}{r_{1,2}}; \quad \varrho_1 = \psi'(1) \psi''(1), \quad \varrho_2 = \psi'(2) \psi''(2), \quad (3)$$

wobei  $d\tau_1$  und  $d\tau_2$  die Elementarvolumina im Konfigurationsraum des ersten und des zweiten Elektrons darstellen.  $r_{1,2}$  ist der Abstand zwischen den Elektronen.

4. a) Die effektive Wechselwirkung der Elektronen mit den Wärmeschwingungen des Gitters<sup>2)</sup> führt zum Kreislauf der  $4s-3d$ -Elektronen in den quasistetigen Bändern der Übergangsmetalle vom Eisentyp. In Abb. 3 ist dieser Kreislauf durch die Pfeile angezeigt. Die Lebensdauern der Elektronen im  $d$ -Band,  $\delta$ -Band und  $\Delta$ -Band sind mit  $\tau_d$ ,  $\tau_\delta$  und  $\tau_{sd}$  bezeichnet. Nach<sup>2)</sup> wird das  $3d$ -Elektron bei Zimmertemperatur in der Zeit  $\tau_d \sim 10^{-11}$  sec in das  $\delta$ -Band gehoben (Abb. 3). In der Zeit  $\tau_\delta \sim 10^{-15}$  sec fällt das Elektron aus dem  $\delta$ -Band in die Fermi-Ebene des  $4s$ -Bandes unter Bildung des  $\Delta$ -Bandes (Abb. 3). Aus dem  $\Delta$ -Band fällt das Elektron in  $\tau \sim 10^{-12}$  sec zurück in die Fermi-Ebene des  $3d$ -Bandes<sup>5)</sup>, d. h.

$$\tau_\delta \sim 10^{-15} \text{ sec}, \quad \tau_{sd} \sim 10^{-12} \text{ sec}, \quad \tau_d \sim 10^{-11} \text{ sec}. \quad (4)$$

Die Dauer  $K \rightarrow L_{111}$  des Überganges des Atoms eines Elementes der Eisengruppe<sup>6)</sup> ist

$$\tau_\alpha \gtrsim 10^{-12} \text{ sec}. \quad (5)$$

Aus der relativen Intensität  $\frac{K \beta_1}{K \alpha_1}$ <sup>7)</sup> folgt, daß die Übergangsdauer  $K \rightarrow M_{11,111}$

$$\tau_\beta \lesssim 10 \tau_\alpha \sim 10^{-11} \text{ sec} \quad (6)$$

beträgt. Die Formeln (4), (5) und (6) führen zu der Ungleichheit

$$\tau_d \gtrsim \tau_\beta \gg \tau_\alpha \gtrsim \tau_{sd} \gg \tau_d. \quad (7)$$

b) Die Zahl der Elektronen sei proportional der Lebensdauer  $\tau$  in den entsprechenden Bändern. Wir beschränken uns auf einmalige Anregungen. In diesem Falle ist die Zahl der  $3d$ -Elektronen, die in das  $4s$ -Band überführt

<sup>4)</sup> D. Coster u. R. Kronig, *Physica* **2**, 13 (1935); G. Wentzel, *Z. Physik* **48**, 524 (1927); E. Fues, *Z. Physik* **43**, 726 (1927).

<sup>5)</sup> Bei den Elementen Cu—Mn finden die zu den in Abb. 3 gezeigten Übergängen entgegengesetzten Übergängen seltener statt<sup>2)</sup>.

<sup>6)</sup> W. Heitler, *Quantum Theory of Radiation*, 1954.

<sup>7)</sup> H. T. Meyer, *Wissenschaftliche Veröffentlichungen aus dem Siemens-Konzern* **7**, 108 (1929).

werden können, gleich der Zahl  $N$  der Atome im betrachteten Metallstück zu setzen. Folglich beträgt die Zahl der Elektronen bei Zimmertemperatur

$$\left. \begin{array}{l} \text{im } d\text{-Band } \sim N \\ \text{im } \Delta\text{-Band } \Delta N \sim 10^{-1} N \\ \text{im } \delta\text{-Band } \delta N \sim 10^{-4} N \end{array} \right\} \quad (8)$$

5. Im Übergangsmetall der Eisengruppe unterscheiden wir zwei Arten von  $d \rightarrow s$ -Übergängen.

a) Die Übergänge finden zwischen den  $3d$ - und  $4s$ -Termen eines und deselben Atomes statt. Dabei beträgt die Energiedifferenz zwischen den  $3d$ - und  $4s$ -Termen eines Übergangselementes der Eisengruppe  $\Delta E \sim 2 R y$ .

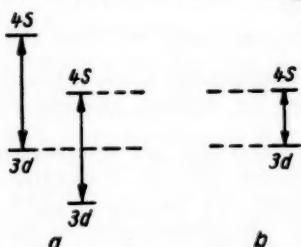


Abb. 2. Schematische Darstellung der  $s \rightarrow d$ -Übergänge im Metall:  
a — in einem und demselben Atom,  
b — in verschiedenen Atomen

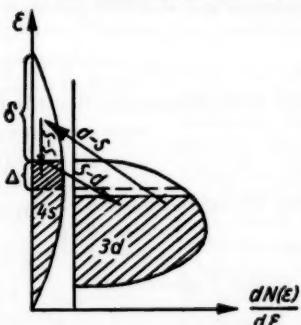


Abb. 3. Schematische Darstellung des Elektronenkreislaufes in den quasistetischen  $4s$ - und  $3d$ -Bändern der Übergangsmetalle vom Eisentyp

in die Größe  $\Delta E \sim 2 R y$  verschoben sein, die ungefähr gleich der Differenz der  $3d$ - und  $4s$ -Termen in einem und demselben Ion ist. Vier Satelliten 3, 4, 9 und 10 (Abb. 4) entstehen, wenn gleichzeitig mit den  $K \rightarrow L_{111}$ - oder  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Übergängen ein Sprung des Elektrons aus den angefüllten Teilen des  $4s$ - oder  $3d$ -Bandes in das  $\delta$ -Band oder umgekehrt stattfindet (Abb. 3, Satz 5b).

Der  $4s \rightarrow 3d$ -Übergang findet dabei in der Zeit  $\tau_{4s} \sim 10^{-12}$  sec statt. In Abb. 2a ist eine schematische Darstellung der Energiedifferenzen zwischen den  $4s$ - und  $3d$ -Termen der einzelnen Ionen im Gitter gezeigt.

b) Die Wechselwirkung von Elektronen mit Wärmeschwingungen des Gitters (2) bewirkt Übergänge zwischen den  $3d$ - und  $4s$ -Termen zweier verschiedener Ionen. Die Energiedifferenz zwischen den  $3d$ - und  $4s$ -Termen beträgt dabei  $\Delta E \sim 1 R y$ . In Abb. 2b ist schematisch die Differenz zwischen den  $3d$ - und  $4s$ -Termen zweier verschiedener Ionen im Gitter dargestellt. In Abb. 3 ist eine schematische Darstellung von Übergängen in quasistetischen  $4s$ - und  $3d$ -Bändern für das Metall im ganzen gezeigt. Der Satz 5a wird für die Erklärung der Entstehung des Satelliten  $K\alpha_3$ , und der Satz 5b wird für die Erklärung des Satelliten  $K\beta'$  benutzt. Die angeführten Sätze erlauben die Voraussage einer Reihe von Satelliten der  $K\alpha_1$ - und  $K\beta_1$ -Linien.

Wenn gleichzeitig mit  $K \rightarrow L_{111}$ - oder  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Übergängen (die die Linien  $K\alpha_1$  bzw.  $K\beta_1$  erzeugen\*) ein Sprung eines  $3d$ -Elektrons auf den  $4s$ -Term desselben Ions oder umgekehrt stattfindet (Abb. 2a, Satz 5a), so sind die Satelliten 1, 2, 7, 8 zu erwarten (Abb. 4). Für Elemente der Eisengruppe werden die Energien dieser Satelliten gegenüber den entsprechenden erzeugenden Linien

Für Elemente der Eisengruppe werden Energien dieser Satelliten gegenüber den Energien der entsprechenden erzeugenden Linien um die Größe  $\Delta E \sim 1 R y$  verschoben sein, die gleicher Ordnung mit der energetischen Breite des quasi-stetigen  $4s$ -Bandes ist.

Vier Satelliten 5, 6, 11, 12 (Abb. 4) entstehen, wenn gleichzeitig mit den  $K \rightarrow L_{111}$ - oder  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Übergängen ein Sprung eines  $4s$ -Elektrons aus dem  $\Delta$ -Band auf die Fermi-Ebene des  $3d$ -Bandes oder umgekehrt stattfindet (Abb. 3, Satz 4b). Bei Zimmertemperatur werden die Energien dieser Satelliten gegenüber den Energien der entsprechenden sie erzeugenden Linien um die Größe  $\Delta E \sim 0,1 R y$  verschoben sein, die großenordnungsmäßig gleich der Höhe der Aufschichtung  $\Delta$  ist<sup>2)</sup>.

Wir haben noch die Wahrscheinlichkeit der Entstehung der Satelliten abzuschätzen, da der entsprechende Satellit nicht beobachtet werden kann, wenn diese Wahrscheinlichkeit zu klein ist.

Nach Bloch<sup>1)</sup> ist die Wahrscheinlichkeit  $W_{1,B}$  dafür, daß im Moment der  $K$ -Ionisation des Atoms sein  $3d$ -Elektron auf das  $4s$ -Niveau desselben Atoms übergeht (Satz 5a), ungefähr gleich eins, d. h.

$$W_{1,B} \sim 1. \quad (9)$$

Die Wahrscheinlichkeit,  $W_{1,A}$ , daß das  $K$ -ionisierte Atom ein  $3d$ -Elektron besitzt, das in das  $\Delta$ -Band geworfen ist (Abb. 3), beträgt nach (8) Satz 4b:

$$W_{1,A} \sim \frac{\Delta N}{N} \sim 0,1. \quad (10)$$

Diese Bedingungen (9) und (10) ermöglichen die Entstehung der kurzweligen Satelliten 6, 12, 2, 8 (Abb. 4). Jedoch befinden sich nach Formel (7), (Satz 4a), vor dem  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Übergang ( $K\beta'$ -Ausstrahlung) alle Elektronen, die auf die  $4s$ -Terme übergehen, praktisch auf der Fermi-Ebene des  $3d$ -Bandes ( $\tau_{sd} \lesssim \tau_\alpha \ll \tau_\beta$ ). Sie können entweder gleichzeitig mit dem  $K \rightarrow L_{111}$ -Übergang übergehen, indem sie den  $K\alpha_3$ -Satelliten bilden, oder sie bilden einfache  $s \rightarrow d$ -Übergänge, bevor der  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Übergang stattfindet. Das  $K$ -ionisierte Atom mit einem angeregten  $3d$ -Elektron auf dem  $4s$ -Term desselben

oder eines anderen Ions ist bereit zum Aussenden von kurzweligen Satelliten der Linie  $K\alpha_1$ , und nicht bereit zum Aussenden von kurzweligen Satelliten der  $K\beta_1$ -Linie. Infolgedessen werden die Satelliten 12 und 8 (Abb. 4) nicht beobachtet.

Es bleibt die relative Wahrscheinlichkeit  $W_2$  des gleichzeitigen doppelten Überganges für die Satelliten 6 und 2 (Abb. 4) nach Formel (2) (Satz 2) abzuschätzen. Für beide Satelliten der Elemente der Gruppe Fe (1) gilt

$$r_1 \sim \frac{a_0}{8}$$

$$r_2 \sim \frac{a_0}{2}. \quad (11)$$

(Hier ist  $a_0$  der Bohrsche Radius.)

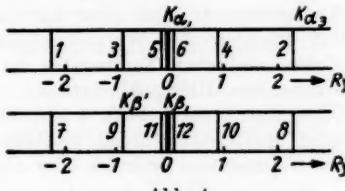


Abb. 4

Die Verschiebungsgesnergie der Satelliten beträgt

$$\Delta E_2 \sim 2,25 R y, \Delta E_6 \sim 0,1 R y. \quad (12)$$

An den Formeln (1), (2), (9), (10) (11) und (12) erhalten wir für die relative Wahrscheinlichkeit  $W$  der Satelliten 6 und 2 (Abb. 4) der Elemente der Eisengruppe die Größen  $\sim 0,1$  bzw.  $\sim \frac{1}{330}$ .

Die Wahrscheinlichkeit  $W_1$  dafür, daß im Moment des Überganges in den Zustand der  $K$ -Ionisation das Atom ein in das  $\delta$ -Band geworfenes  $3d$ -Elektron hat (8) (Abb. 3, Satz 4b) ist  $\frac{\delta N}{N} \sim 10^{-4}$ . Ein entsprechender Satellit fehlt sowohl für die  $K\alpha_1$ -Linie als auch für die  $K\beta_1$ -Linie. Folglich werden die Satelliten 4 und 10 (Abb. 4) nicht beobachtet.

Das Entstehen der Satelliten 5 und 11 (Abb. 4) ist durch das Pauli-Prinzip verboten: Das  $\Delta$ -Band wird als vollkommen besetzt angenommen. Auf diese Weise haben von den acht möglichen Satelliten 5, 6, 4, 2, 11, 12, 10, 8 (Abb. 4) nur zwei genügende Entstehungswahrscheinlichkeiten, nämlich 2 und 6 (Abb. 5).

Wir gehen nun zu den langwvlligen Satelliten 1, 3, 7, 9 über (Abb. 4). Die Größen  $p_1, p_3, p_7, p_9$  sind nach Formel (3) (Satz 3) bestimmt. Der Vergleich dieser Größen läßt den Schluß zu, daß  $p_9$  bedeutend kleiner als alle übrigen drei  $p_1, p_3$  und  $p_7$  ist. Daraus folgt, daß die Entstehung des Satelliten 9 (Abb. 4) sehr viel unwahrscheinlicher ist<sup>8)</sup>, als die Entstehung der Satelliten 1, 3 und 7 (Abb. 4).

Das Experiment ergibt das Gegenteil: und zwar werden die Satelliten 1, 3 und 7 (Abb. 4) überhaupt nicht beobachtet, während die Röntgenspektren aller Übergangsmetalle der Eisengruppe und ihrer Legierungen äußerst helle Satelliten 9 (Abb. 4) aufweisen, die als Satelliten  $K\beta'$  bekannt sind. Wir nehmen an, daß diese  $K\beta'$ -Satelliten ihre Entstehung dem aktiven Einfluß energiereicher Wärmequanten verdanken.

Bei endlicher Temperatur finden unter den  $3d$ -Elektronen beliebiger Atome von Übergangsmetallen oder Legierungen äußerst häufige  $d \rightarrow s$ -Übergänge statt<sup>2)</sup> (Satz 4 und 5b). Es versteht sich, daß diese Übergänge gleich häufig stattfinden, unabhängig davon, ob das Atom sich im Zustand der  $K$ -Ionisation befindet oder nicht.

Das  $K$ -ionisierte Atom besitzt eine hohe Ionisationsenergie. Im Ion, das sich im Zustand der  $K$ -Ionisation befindet, kann gleichzeitig mit dem  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Übergang ein Sprung eines  $3d$ -Elektrons auf das  $4s$ -Band stattfinden (auf den  $4s$ -Term eines anderen Atoms). Dieser Sprung wird jedoch nicht durch Wärmequanten verursacht, wie bei nichtionisierten Atomen, sondern durch die Energie des  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Überganges, was zum Entstehen des  $K\beta'$ -Satelliten führt. Tatsächlich ist es wahrscheinlicher anzunehmen, daß ein  $3d-4s$ -Übergang eher auf Grund der Energie des  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Überganges stattfindet, als durch die Wechselwirkung mit Wärmequanten, da die Wechselwirkung zwischen  $M_{11,111}$ - und  $3d$ -Elektronen des betrachteten Atoms sehr viel größer ist, als die Wechselwirkung zwischen  $3d$ - und  $4s$ -Elektronen verschiedener Atome.

<sup>8)</sup> Die Satelliten 1, 3, 7, 9, (Abb. 4) werden wegen ihrer geringen Entstehungswahrscheinlichkeit nicht beobachtet.

Energiereiche Wärmequanten bestimmen durch ihren induzierenden Einfluß die Energie des  $d \rightarrow s$ -Überganges. Wir haben also nach Formel (2) (Satz 2) für die relativen Wahrscheinlichkeiten  $W_2$  des gleichzeitigen Überganges von Elektronen im Falle des  $K\beta'$ -Satelliten (9 in Abb. 4):

$$W_2 \sim 1 \left( r_1 \sim \frac{a_0}{3.4}; \quad r_2 \sim \frac{a_0}{2}; \quad \Delta E \simeq 0.69 \text{ Ry} \right) \quad (12)$$

und im Falle des Satelliten 3 (Abb. 4)

$$W_2 \sim \frac{1}{32} \left( r_1 \sim \frac{a_0}{8}; \quad r_2 \sim \frac{a_0}{2}; \quad \Delta E \simeq 0.69 \text{ Ry} \right). \quad (13)$$

Auf diese Weise können also infolge der induzierenden Wirkung der Wärmequanten die Satelliten  $K\beta'$  und 3 (Abb. 4) beobachtet werden. Die Satelliten 1 oder 7 (Abb. 4) werden jedoch nicht beobachtet, da die Wärmequanten im Falle der Übergangsmetalle keine Energien der Größenordnung  $2 \text{ Ry}$  besitzen, die für den erzwungenen Übergang in diesem Atom notwendig ist<sup>2)</sup> (Satz 5); deshalb fehlen diese auch in Abb. 5.

Wir bestimmen nun die relative Intensität  $W$  der Ausstrahlung von langwelligen Satelliten  $K\beta'$  und 3 (Abb. 4).

Die Wahrscheinlichkeit  $W'_1$  dafür, daß das Atom, das in den Zustand der  $K$ -Ionisation übergegangen ist, ein angeregtes  $3d$ -Elektron enthält, beträgt

$$W'_1 \sim \frac{N_n}{N_n + N_b}. \quad (14)$$

Hier bedeuten  $N_n$  und  $N_b$  die Zahl der Atome mit nicht angeregten bzw. angeregten  $3d$ -Elektronen. In der Zeit  $\tau_{sd} \ll \tau_\beta$  gelingt es im Durchschnitt  $N_b$  Atomen, in den Normalzustand überzugehen ( $\tau_{sd}$  ist die Lebensdauer des Elektrons im  $A$ -Band (Abb. 3)). Im Gleichgewichtszustand werden in demselben Zeitintervall  $\tau_{sd}$  von  $N_n$  normalen Atomen bei  $N_b$  Atomen 3  $d$ -Elektronen angeregt; folglich ist in einem bestimmten Atom (von  $N_n$  Atomen) die Wahrscheinlichkeit der Anregung eines  $3d$ -Elektrons proportional  $\frac{N_b}{N_n}$  und die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die  $3d$ -Elektronen des Atoms nicht angeregt bleiben, ist proportional  $\frac{N_n - N_b}{N_n}$ .

Im Zeitintervall  $\tau_{sd}$  gelingt es einer bestimmten Zahl  $\nu$  von Atomen, die sich im Zustand der  $K$ -Ionisation befinden, einen  $K \rightarrow M_{11,111}$ -Übergang auszuführen. Im Ergebnis solcher Übergänge kann z. B. die  $K\beta_1$ -Linie oder der  $K\beta'$ -Satellit entstehen, je nachdem, ob der Übergang  $K \rightarrow M_{11,111}$  ohne einen  $d \rightarrow s$ -Sprung oder gleichzeitig mit einem  $d \rightarrow s$ -Sprung stattfindet. Die Übergänge  $K \rightarrow M_{11,111}$  hängen nicht davon ab, ob das äußere  $3d$ -Elektron im Atom erregt ist oder nicht. Es werden also bei  $\nu$  Übergängen der Form  $K \rightarrow M_{11,111}$  (von  $N_n$  Atomen)  $\nu \frac{N_n - N_b}{N_n}$  Quanten der erzeugenden Linie und  $W_2 \nu \frac{N_b}{N_n}$  Quanten des Satelliten ausgestrahlt, wobei  $W_2$  die Wahrscheinlichkeit des

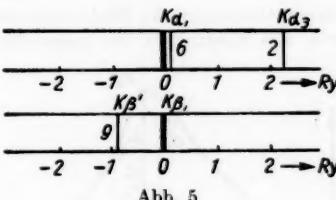


Abb. 5

Doppelüberganges ist; (z. B.  $K \rightarrow M_{11,111}$  und  $3d \rightarrow 4s$ ). Infolgedessen erhalten wir für die relative Intensität des Satelliten zur erzeugenden Linie (von  $N_n$  Atomen)

$$W' \sim \frac{N_b}{N_n - N_b} W_2 \quad (15)$$

und für die relative Intensität des langwelligeren Satelliten zur erzeugenden Linie (unter Berücksichtigung der Gesamtzahl von  $(N_n + N_b)$  Atomen) nach (14) und (15)

$$W \simeq W_2 \frac{N_n N_b}{N_n^2 - N_b^2}. \quad (16)$$

Für die Satelliten  $K\beta'$  und 3 (Abb. 4) erhält man nach Formel (16):

$$W_{K\beta'} \simeq \frac{N_n N_b}{N_n^2 - N_b^2},$$

$$W_{\text{Sat}3} \simeq \frac{1}{32} \frac{N_n N_b}{N_n^2 - N_b^2}. \quad (17)$$

Der Satellit 3 (Abb. 4), der an der Basis der hellen  $K\alpha_1$ -Linie liegt, kann unter Umständen infolge starker Diffusität nicht beobachtet werden.

### Folgerungen und experimentelle Angaben

Die relative Intensität der Ausstrahlung des  $K\beta'$ -Satelliten des Eisens hängt von den Untersuchungsbedingungen ab. Wenn man annimmt, daß die Temperatur der Probe bei der Sekundärerregungsmethode  $\sim 400^\circ\text{K}$  und bei primärer Erregung  $\sim 700^\circ\text{K}$  beträgt, dann ergibt sich nach (17) die relative Intensität von  $K\beta'$  in völliger Übereinstimmung mit dem Experiment zu  $\sim 20\%$  bzw.  $\sim 50\%$ <sup>9-11</sup>. (Auf Grund des experimentell ermittelten Temperaturanges der Elektronenwärmekapazitäten bei tiefen Temperaturen, sowie aus Messungen der magnetischen Suszeptibilität entnehmen wir, daß

die Zahl der Eisenatome mit angeregten  $3d$ -Elektronen in erster Näherung proportional der absoluten Temperatur ist ( $N_b \sim T$ ) und sie bei  $T \sim 1200^\circ\text{K}$  Werte von  $N_b \sim \frac{N}{2}$  erreicht<sup>2</sup>).

Die Linie  $K\alpha_1$  und der Satellit 6 (Abb. 6) sind nicht trennbar. Das Zusammenfallen des Satelliten 6 (Abb. 6) mit der ihn erzeugenden Linie  $K\alpha_1$  (punktierter Linien) er-

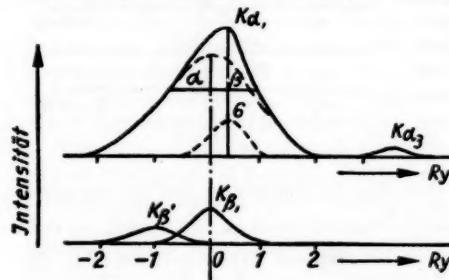


Abb. 6

gibt eine stark asymmetrische  $K\alpha_1$ -Linie (Abb. 6). Vollkommen analog entsteht die Asymmetrie der  $K\alpha_2$ -Linie in völliger Übereinstimmung mit dem Versuch.

<sup>9)</sup> Ja. M. Fogel, J. exp. theoret. Physik **10**, 455 (1940).

<sup>10)</sup> G. Ortner, Nature **117**, 828 (1926).

<sup>11)</sup> M. T. Druywesteyn, Z. Physik **48**, 707 (1928).

Von den zwölf in Abb. 4 gezeigten Satelliten werden in voller Übereinstimmung mit dem Experiment nur drei Satelliten beobachtet: Satellit 2 (Abb. 5 oder Abb. 6), der als  $K\alpha_3$ -Satellit bekannt ist; Satellit 5 (Abb. 5 oder Abb. 6), der als  $K\beta'$  bekannt ist und Satellit 6 (Abb. 5 oder Abb. 6), der die Asymmetrie der  $K\alpha_1$ -Linie bewirkt.

Die beobachtbare starke Diffusität des  $K\beta'$ -Satelliten, die Abhängigkeit der Wellenlänge vom Typ der chemischen Bindung und von der Gitterstruktur, sowie die ungleiche Verschiebung der  $K\alpha_3$  und  $K\beta'$ -Satelliten von der sie erzeugenden Linien erhärtet vollständig die Rolle der Übergänge zwischen den Bändern<sup>2)</sup> bei der Satellitenbildung.

Tbilissi, Puschkin-Institut.

Bei der Redaktion eingegangen am 9. Dezember 1958.

A. P  
Mod  
eine  
tion  
im  
Teil  
eine  
ode  
Im  
Zeit  
(2b  
For  
nat  
Wi  
ers  
feld  
zug  
pse  
gen  
(3)  
ist  
wi  
ist  
ha  
(1  
fü  
ph  
lie  
Th  
du  
Za  
Tu  
(3  
U

## **Zur Frage der Existenz von singularitätsfreien Lösungen der allgemein-relativistischen Feldgleichungen, die Teilchenmodelle darstellen könnten**

*Von A. Papapetrou und H. Treder*

Mit 4 Abbildungen

### **Inhaltsübersicht**

Die von Einstein gestellte Frage nach der Existenz von singularitätsfreien Lösungen der Gravitationsgleichungen, die die Grenzbedingung  $g_{\mu\nu} \rightarrow \eta_{\mu\nu}$  für  $r \rightarrow \infty$  erfüllen (und die als Modelle von beständigen Teilchen verwendbar sein könnten), wurde für den Fall der stationären Lösungen durch die Untersuchungen von Einstein und Pauli und von Lichnerowicz negativ beantwortet. In der vorliegenden Arbeit wird die Existenz von zeitlich periodischen singularitätsfreien Lösungen der Gravitationsgleichungen diskutiert. Aus den Ergebnissen von Papapetrou über das asymptotische Verhalten von periodischen Feldern folgt, daß eine solche Lösung nur in einem endlichen Innenbereich des dreidimensionalen Raumes, in dem das Gravitationsfeld stark ist, zeitlich periodisch sein könnte und mittels einer Sprungfläche an ein stationäres Außenfeld anzuschließen wäre. Aus Stellmachers Untersuchungen über die mit den Feldgleichungen verträglichen Sprünge folgt nun, daß diese Sprungfläche eine glatte Nullhyperfläche sein muß. Es wird dann ein geometrischer Satz über glatte Hyperflächen hergeleitet, aus dem sich ergibt, daß eine derartige Sprungfläche nicht existieren kann. Demnach erlaubt Einsteins Theorie des reinen Gravitationsfeldes auch keine zeitlich periodischen singularitätsfreien Lösungen und somit keine Modelle beständiger Teilchen. — Auf dasselbe negative Ergebnis führt auch die Diskussion der notwendigen Eigenschaften von zeitlich periodischen singularitätsfreien Lösungen der Einstein-Maxwellschen Feldgleichungen für das kombinierte Gravitations- und elektromagnetische Feld.

### **1. Einleitung**

Einsteins Programm einer einheitlichen Feldtheorie bedingt die Vorstellung, daß die Elementarteilchen als singularitätsfreie Lösungen der Feldgleichungen darstellbar sind. Nach Einsteins Idee sind die Elementarteilchen als Feldkonzentrationen aufzufassen, deren Existenz durch die Wirkung des Feldes auf sich selbst gewährleistet wird und somit eine Folge der Nichtlinearität der Feldgleichungen ist.

Einstein<sup>1)</sup> hat sehr früh die Frage aufgeworfen, ob vielleicht schon die allgemein-relativistische Theorie des reinen Gravitationsfeldes derartige

<sup>1)</sup> Vgl. A. Einstein, Berliner Berichte, 1919, S. 349; 1923, S. 359.

Modelle von beständigen Teilchen zuläßt. Derartige Teilchenmodelle würden einem Gravitationsfeld  $g_{\mu\nu}$  entsprechen, das die Einsteinschen Gravitationsgleichungen

$$R_{\mu\nu} = 0 \quad (1)$$

im ganzen Raum erfüllt. Damit ein solches Gravitationsfeld ein beständiges Teilchen darstellt, muß bei passender Wahl des Koordinatensystems ferner einer der beiden folgenden Fälle vorliegen:

a)  $g_{\mu\nu}$  ist im ganzen Raum zeitunabhängig, d. h.

$$g_{\mu\nu} = g_{\mu\nu}(x^1, x^2, x^3) \quad (2a)$$

oder

b)  $g_{\mu\nu}$  hängt mit einer Periode  $T$  periodisch von der Zeit ab, d. h. es ist

$$g_{\mu\nu} = g_{\mu\nu}(x^1, x^2, x^3, x^0) = g_{\mu\nu}(x^1, x^2, x^3, x^0 + T). \quad (2b)$$

Im Fall b) werden wir voraussetzen, daß  $g_{\mu\nu}$  wesentlich periodisch von der Zeit abhängt, schließen also jedes  $g_{\mu\nu}$  aus, das nur scheinbar von der Form (2b) ist und durch eine passende Koordinatentransformation auf die stationäre Form (2a) gebracht werden kann<sup>2)</sup>.

Die Existenz und die Art solcher singularitätsfreien Lösungen hängt natürlich von den Randbedingungen ab, die für die  $g_{\mu\nu}$  gefordert werden. Wir werden unseren Betrachtungen die von Einstein<sup>3)</sup> schon bei seiner ersten Untersuchung des zeitunabhängigen singularitätsfreien Gravitationsfeldes benutzte Grenzbedingung

$$g_{\mu\nu} \rightarrow \eta_{\mu\nu} \quad \text{für } r = \sqrt{(x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2} \rightarrow \infty \quad (3)$$

zugrunde legen, also fordern, daß für  $r \rightarrow \infty$  die Metrik asymptotisch in die pseudo-euklidische Minkowski-Metrik übergeht. Aus (3) folgt, daß für genügend große  $r$  das Gravitationsfeld notwendig schwach ist. Die Bedingung (3) ist im wesentlichen der Annahme äquivalent, daß es physikalisch sinnvoll ist, ein isoliertes Teilchen zu betrachten und anzunehmen, daß die Wechselwirkung von zwei sehr weit voneinander entfernten Teilchen sehr schwach ist<sup>4)</sup>.

Für das erste Problem der zeitunabhängigen singularitätsfreien Lösungen haben nun zunächst Einstein sowie Einstein und Pauli<sup>5)</sup> gezeigt, daß aus (1) und (3) das Verschwinden der Gesamtenergie  $J_0$  des Feldes folgt. Denn für derartige Felder gilt die Beziehung

$$J_0 = \int_{x^0 = \text{const}} t_0^0 dV_3 = \int_{x^0 = \text{const}} \sqrt{-g} R_0^0 dV_3 \quad (4)$$

<sup>2)</sup> Vgl. A. Papapetrou, Ann. Physik (6) **20**, 399 (1957).

<sup>3)</sup> A. Einstein, Revista (Univ. Nac. de Tucuman) A **2**, 11 (1941).

<sup>4)</sup> A priori darf man wohl nicht den Fall ausschließen, daß die Grenzbedingung (3) physikalisch unzutreffend ist und man vielmehr von der Hypothese eines räumlich endlichen Weltalls etwa im Sinne der Betrachtungen Eddingtons (vgl. Fundamental Theory, Cambridge 1948) ausgehen muß. In diesem Fall wäre die Grenzbedingung (3) durch einfache Eindeutigkeitsbedingungen zu ersetzen. Es sei jedoch bemerkt, daß bei Zugrundelegung eines räumlich endlichen Weltalls die Behandlung des Einsteinschen Teilchenproblems sehr viel komplizierter wäre als bei Verwendbarkeit der Grenzbedingung (3). Denn in einem solchen kosmologischen Raum müßten im Prinzip alle Teilchen des Universums gleichzeitig berücksichtigt werden.

<sup>5)</sup> A. Einstein, l. c. Anm. 3; A. Einstein u. W. Pauli, Annals of Math. **44**, 131 (1943).

und die rechte Seite von (4) verschwindet wegen (1). Lichnerowicz<sup>6)</sup> hat dann weiter bewiesen, daß es bei Erfüllung der Grenzbedingung (3) überhaupt keine nichttrivialen zeitunabhängigen singularitätsfreien Lösungen der Einsteinschen Gravitationsgleichungen (1) gibt: Die vierdimensionale Riemannsche Raum-Zeit-Mannigfaltigkeit ist bei Gültigkeit von (1), (2a) und (3) mit der ebenen Minkowski-Welt identisch.

Nach diesem negativen Ergebnis ist nur noch die zweite Möglichkeit, nämlich die Existenz von zeitlich periodischen singularitätsfreien Lösungen, zu diskutieren. Nun hat Papapetrou<sup>7)</sup> für solche Lösungen bewiesen, daß sie in dem gemäß (3) existierenden räumlich unendlich ausgedehnten Bereich  $r \geq a$ , in dem das Feld schwach ist, notwendig zeitunabhängig sein müssen. Ist also das Gravitationsfeld im ganzen Raum schwach, so gibt es überhaupt keine zeitlich periodischen singularitätsfreien  $g_{\mu\nu}$ . Hieraus folgt als eine notwendige Bedingung für die Existenz eines zeitlich periodischen singularitätsfreien Gravitationsfeldes der durch Abb. 1 veranschaulichte Feldverlauf: In dem räumlich unendlichen Bereich  $r \geq a$  ist das Gravitationsfeld überall schwach und stationär. In dem räumlich endlichen Bereich  $r < a$  ist das Gravitationsfeld hingegen teilweise stark und zeitlich periodisch. Dieser Innenbereich muß also in zwei durch eine Hyperfläche  $\Sigma$  voneinander getrennte Teilbereiche zerfallen. Innerhalb des von  $\Sigma$  umschlossenen Gebiets  $B$  ist das Gravitationsfeld stark und zeitlich periodisch. Im Außenbereich  $A$ , zu dem

auch der Bereich  $r \geq a$  des schwachen Feldes gehört, ist das Gravitationsfeld hingegen stationär.

Ein derartiger Verlauf des Gravitationsfeldes ist nur dann möglich, wenn auf der Hyperfläche  $\Sigma$  gewisse Ableitungen der  $g_{\mu\nu}$  unstetig sind. Wären nämlich auf  $\Sigma$  die Ableitungen jeder Ordnung stetig, so wäre die Fortsetzung des zeitunabhängigen Feldes aus dem Bereich  $A$  in den Bereich  $B$  nach den Ergebnissen von Lichnerowicz<sup>8)</sup> über das Cauchysche Problem der allgemeinen Relativitätstheorie ebenfalls zeitunabhängig. In der Tat wäre dann die Funktion  $g_{\mu\nu}$  im Bereich  $B$  einfach die analytische Fortsetzung der Funktion  $g_{\mu\nu}$  im Bereich  $A$ . Die Hyperfläche  $\Sigma$  muß demnach eine Sprungfläche des betrachteten Problems sein.

In dem folgenden § 2 werden wir die Eigenschaften der Sprungfläche  $\Sigma$  näher untersuchen. Im § 3 wird ein geometrischer Satz über glatte Hyperflächen bewiesen. Im § 4 werden wir dann mit Hilfe dieses Satzes beweisen können, daß es in der allgemeinen Relativitätstheorie keine zeitlich periodischen, die Grenzbedingung (3) befriedigenden, singularitätsfreien Gravitationsfelder gibt. Und wir werden ferner zeigen, daß derselbe Satz auch für die

<sup>6)</sup> A. Lichnerowicz, C. R. hebdom. Séances Acad. Sci. **222**, 432 (1946); Théories relativistes de la gravitation et de l'Électromagnétisme, Paris 1955, S. 126—146.

<sup>7)</sup> A. Papapetrou, Ann. Physik (6) **20**, 399 (1957); (7) **1**, 186 (1958); **2**, 87 (1958).

<sup>8)</sup> A. Lichnerowicz, l. c. Anm. 6, S. 27—33.

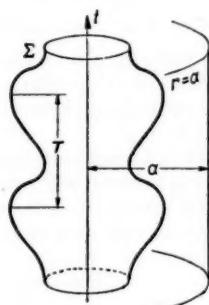


Abb. 1

Einstein-Maxwellsche Theorie des kombinierten Gravitations- und elektromagnetischen Feldes gilt.

## 2. Die Sprungfläche

Der von uns zu betrachtende Raum ist eine reguläre Riemannsche Raum-Zeit-Mannigfaltigkeit  $V_4$ , deren Metrik den Einsteinschen Gravitationsgleichungen (1) und der Grenzbedingung (3) genügt. Die Signatur der Metrik muß überall dieselbe wie die der Minkowskischen Metrik  $\eta_{\mu\nu}$  sein, die  $g_{\mu\nu}$ , müssen also lokal immer auf die Minkowskische Form zurückführbar sein. Entsprechend der Grenzbedingung (3) ist der  $V_4$  in den drei unabhängigen raumartigen Richtungen offen. Ferner muß der  $V_4$  aus physikalischen Gründen auch in Richtung der Zeitkoordinate offen sein. Der betrachtete  $V_4$  ist somit topologisch homolog zur pseudoeuklidischen Minkowski-Welt.

Für die Beweisführung im § 3 genügt es zu bemerken, daß es in einem solchen  $V_4$  eine Schar von sich nicht schneidenden raumartigen Hyperflächen gibt derart, daß jeder Punkt des  $V_4$  auf genau einer dieser Flächen liegt. Durch diese Schar von raumartigen Hyperflächen wird eine dazu orthogonale Schar von zeitartigen Weltlinien definiert<sup>9)</sup>. Dabei kann man das Koordinatensystem so wählen, daß die raumartigen Hyperflächen der betrachteten Schar mit den Hyperflächen  $x^0 = \text{const}$  zusammenfallen. Dann sind die zu dieser Schar orthogonalen zeitartigen Weltlinien die Parameterkurven von  $x^0$  (vgl. Abb. 2).

Bei dem von uns behandelten Problem des zeitlich periodischen singularitätsfreien Feldes ist es zweckmäßig, die Schar der raumartigen Hyperflächen so zu wählen, daß sie im Bereich  $r \geq a$  des schwachen Feldes (Abb. 1) mit den Hyperflächen  $x^0 = \text{const}$  desjenigen Koordinatensystems zusammenfallen, in dem dieses Feld zeitunabhängig ist. Es sei noch die für das Folgende wesentliche Tatsache hervorgehoben, daß die durch die Gleichung  $r = a$  bestimmte Hyperfläche glatt und zeitartig ist.

Wir betrachten nun die auf Abb. 1 gezeigte Sprungfläche  $\Sigma$ . Es muß zunächst die für die folgende Beweisführung wichtige Tatsache hervorgehoben werden, daß die Fläche  $\Sigma$  ganz im Innern des durch die zeitartige Fläche  $r = a$  begrenzten Bereichs liegt, diese Fläche also nirgends schneidet oder berührt. Wegen der Periodizität des gesamten Gravitationsfeldes wird auch die Sprungfläche  $\Sigma$  mit derselben Periode  $T$  wie  $g_{\mu\nu}$  zeitlich periodisch sein müssen.

Da ferner das Feld im Bereich  $B$  als wesentlich und nicht nur scheinbar periodisch vorausgesetzt wurde, im Bereich  $A$  dagegen zeitunabhängig ist, muß es auf  $\Sigma$  nichtforttransformierbare Sprünge gewisser Ableitungen der  $g_{\mu\nu}$  geben. Nach den Ergebnissen von Stellmachers Diskussion des Sprung-

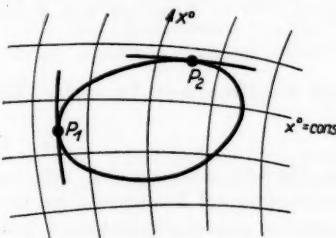


Abb. 2

<sup>9)</sup> L. P. Eisenhart, Riemannian geometry, Princeton 1949, S. 41–43.

problems in der allgemeinen Relativitätstheorie<sup>10)</sup> muß daher die Fläche  $\Sigma$  eine Nullfläche des betrachteten regulären Riemannschen  $V_4$  sein. Ist also die Sprungfläche  $\Sigma$  etwa durch die Gleichung

$$z = z(x^1, x^2, x^3, x^0) = 0 \quad (5)$$

gegeben, so ist ihr Normalvektor

$$p_\mu \equiv z_{,\mu} \quad (5a)$$

ein Nullvektor:

$$g^{\mu\nu} p_\mu p_\nu \equiv p^\nu p_\nu = 0. \quad (6)$$

Aus den Feldgleichungen (1) folgt noch eine weitere wichtige Eigenschaft der Sprungfläche: Die Stoßwellen des Gravitationsfeldes breiten sich längs der Bicharakteristiken der Einsteinschen Feldgleichungen aus, d. h. längs der Trajektorien des Normalvektors  $p_\mu$  der Sprungfläche. Diese Trajektorien sind die auf der Nullfläche liegenden geodätischen Nulllinien mit der Gleichung

$$p^\mu_{,\nu} p^\nu = p^\mu_{,\nu} p^\nu + \Gamma^\mu_{\sigma\nu} p^\sigma p^\nu = 0. \quad (7)$$

Ist nun  $\gamma_{\mu\nu}$  der Sprungtensor der niedrigsten unstetigen Normalableitung von  $g_{\mu\nu}$ ,<sup>11)</sup> so folgt aus den Feldgleichungen (1) für die „Sprungerregung“

$$E = \gamma_{\mu\nu} \gamma^{\mu\nu} \quad (8)$$

nach Stellmacher der skalare Erhaltungssatz<sup>12)</sup>

$$(\sqrt{-g} E p^\nu)_{,\nu} = 0. \quad (9)$$

Aus (9) folgt insbesondere, daß, wenn die Sprungerregung  $E$  an irgendeinem Punkt einer auf  $\Sigma$  liegenden geodätischen Nulllinie nicht verschwindet,  $E$  dann längs der ganzen geodätischen Nulllinie von Null verschieden sein wird. Der Skalar  $E$  ist aber positiv definit in dem Sinne, daß aus  $E = 0$  das Verschwinden des nichtforttransformierbaren Teils von  $\gamma_{\mu\nu}$  folgt. Daher ergibt sich aus (9), daß der nichtforttransformierbare Teil von  $\gamma_{\mu\nu}$  auf der ganzen Nullgeodäten von Null verschieden ist, wenn er an einem ihrer Punkte nicht verschwindet.

Diese aus den Feldgleichungen folgende Eigenschaft der Sprünge hat zur Folge, daß die Sprungfläche  $\Sigma$  notwendig eine einheitliche Nullfläche sein muß, welche jede auf ihr liegende Nullgeodäte als Ganzes enthält. Eine solche Nullfläche ist notwendig frei von Kanten, kann also nicht aus Teilen von sich schneidenden Nullflächen zusammengesetzt sein, da dann die Trajektorien des Normalvektors der Sprungfläche  $\Sigma$  entweder Knicke oder Endpunkte be-

<sup>10)</sup> K. Stellmacher, Math. Ann. **115**, 740 (1938). In dieser Arbeit ist der Fall behandelt, daß die niedrigsten unstetigen Ableitungen von  $g_{\mu\nu}$  die zweiten oder höheren Ableitungen sind. Die Stellmacherschen Ergebnisse gelten auch für die Sprünge der ersten Ableitungen wie von A. Papapetrou u. H. Treder, Mathematische Nachrichten, **20** (im Druck) bewiesen wurde; vgl. auch St. O'Brien u. J. L. Synge, Comm. of the Dublin Inst. for Advanced Studies A No. 9 (1952). Die  $g_{\mu\nu}$  selbst können bei Forderung einer regulären Metrik nicht springen, wie in einer späteren Arbeit gezeigt werden soll.

<sup>11)</sup> Vgl. K. Stellmacher, l. c. Anm. 10.

<sup>12)</sup> Nach A. Papapetrou u. H. Treder, l. c. Anm. 10, gilt diese Formel auch für die Sprünge erster Ordnung.

sitzen würden<sup>13)</sup>. — Eine einheitliche Nullfläche kann man sich am einfachsten durch eine Schar von Nullgeodäten gebildet denken, die eine glatte zweidimensionale raumartige Fläche  $V_2$  orthogonal schneiden. Dabei müssen nur die Richtungen dieser Nullgeodäten auf der ganzen Fläche  $V_2$  einheitlich gewählt werden, so daß die benachbarten Punkten des  $V_2$  entsprechenden Nullgeodäten kontinuierlich ineinander übergehen<sup>14)</sup>, da sonst keine kontinuierliche, den vierdimensionalen Raum  $V_4$  teilende, Nullfläche  $\Sigma$  entstehen würde.

Eine einheitliche Nullfläche hat im allgemeinen an jedem Punkt genau einen Normalvektor, ist also eine glatte Hyperfläche. Die einzige Ausnahme bilden die sogenannten konischen Punkte: An solchen Punkten treffen sich verschiedene auf der Nullfläche liegenden Nullgeodäten mit dem Ergebnis, daß die Nullfläche dort keine Normale besitzt. Es ist aber leicht einzusehen, daß die für unser Problem brauchbaren Sprungflächen keine konischen Punkte besitzen können, sondern überall glatt sein müssen. Dies ergibt sich unmittelbar aus Stellmachers Behandlung des Sprungproblems, in der die Eindeutigkeit des Normalvektors  $p_\mu$  eine wesentliche Voraussetzung ist. Formal kann man die Unvereinbarkeit von konischen Punkten der Sprungfläche mit dem Sprungproblem auf Grund des Stellmacherschen Erhaltungssatzes (9) erkennen. Hat nämlich die Sprungfläche  $\Sigma$  etwa den konischen Punkt  $P_K$ , so folgt aus (9), daß die Erregung  $E$  und somit der Sprungtensor  $\gamma_{\mu\nu}$  an  $P_K$  unendlich groß werden. Ein regulärer metrischer Tensor  $g_{\mu\nu}$  läßt sich aber in der Umgebung der Sprungfläche in der Form

$$g_{\mu\nu} = g_{\mu\nu}^- + \gamma_{\mu\nu} h(z) + \dots \quad (10)$$

entwickeln, wobei  $g_{\mu\nu}^-$  und  $\gamma_{\mu\nu}$  regulär sein müssen, während  $h(z)$  eine geeignete Sprungfunktion ist<sup>15)</sup>. Wird  $\gamma_{\mu\nu}$  unendlich groß, so ist diese Entwicklung nicht möglich, d. h. die Metrik  $g_{\mu\nu}$  wird am Punkt  $P_K$  singular.

Für das im folgenden § 3 abzuleitende geometrische Theorem über das Verhalten von einheitlichen Nullhyperflächen ist es jedoch unwesentlich, ob die Nullfläche konische Punkte besitzt oder nicht. Daher werden wir im § 3 beliebige einheitliche Nullhyperflächen, also auch solche mit konischen Punkten, in die Untersuchung einbeziehen.

### 3. Ein geometrischer Satz über glatte Hyperflächen

Wir legen unseren Betrachtungen wieder einen offenen regulären Riemannschen  $V_4$  mit singularitätsfreier Metrik  $g_{\mu\nu}$  zugrunde, der nach den Ausführungen am Anfang des § 2 topologisch homolog zur pseudo-euklidischen Minkowski-Welt ist. Für diesen  $V_4$  beweisen wir zunächst folgendes Lemma:

<sup>13)</sup> Durch das obige Argument wird nicht ausgeschlossen, daß unser Sprungproblem mehrere einheitliche Nullflächen  $\Sigma$  als Sprungflächen besitzt, die sich eventuell schneiden. Für die Beweisführung des § 4 genügt es aber zu bemerken, daß jede dieser Flächen  $\Sigma$  die zeitartige Hyperfläche  $r = a$  nicht schneiden darf.

<sup>14)</sup> Man beachte nämlich, daß es an jedem Punkt des  $V_2$  zwei zum  $V_2$  orthogonale Nullrichtungen gibt. Die Fläche  $V_2$  stellt eine momentane Front der sich auf  $\Sigma$  ausbreitenden Gravitationsstoßwelle dar. Die obige Bedingung für die Richtung der Nullgeodäten bedeutet anschaulich, daß bei einem geschlossenen  $V_2$  entweder eine auslaufende oder eine einlaufende Gravitationswelle vorliegt.

<sup>15)</sup> H. Treder, Ann. Physik (7) 2, 225 (1958).

Jede geschlossene glatte Hyperfläche besitzt Punkte, an denen ihr Normalvektor raumartig, Punkte, an denen er zeitartig, und auch Punkte, an denen er isotrop ist.

Der Beweis ergibt sich unmittelbar aus der Abb. 2, auf der neben der Schar der zeitartigen Parameterkurven von  $x^0$  und der dazu orthogonalen raumartigen Hyperflächen  $x^0 = \text{const}$  auch die glatte geschlossene Hyperfläche  $S$  eingezeichnet ist. Wegen der Geschlossenheit und der Glätte von  $S$  wird es sicher Parameterkurven von  $x^0$  geben, die die Fläche  $S$  an Punkten  $P_1$  tangieren; an solchen Punkten ist der Normalvektor von  $S$  raumartig. Ferner wird es auch Hyperflächen  $x^0 = \text{const}$  geben, die die Fläche  $S$  an Punkten  $P_2$  tangieren, und an solchen Punkten ist der Normalvektor von  $S$  zeitartig. Wegen der Kontinuität des Normalvektors einer glatten Fläche folgt aber aus Stetigkeitsgründen, daß zwischen den Punkten  $P_1$  und  $P_2$  auch Punkte liegen müssen, an denen der Normalvektor ein Nullvektor ist.

Aus diesem Lemma folgt sofort, daß in der zugrunde gelegten Riemannschen Raum-Zeit-Mannigfaltigkeit eine glatte Hyperfläche, deren Normalvektor überall raumartig oder überall zeitartig oder überall isotrop ist, notwendig eine (in mindestens einer Richtung) offene Hyperfläche ist<sup>16)</sup>. Daselbe Ergebnis gilt ersichtlich auch für ganze einheitliche Nullflächen mit konischen Punkten.

Wir betrachten im folgenden glatte Hyperflächen, deren Normalvektor überall denselben Charakter hat (d. h. an allen Punkten der Hyperfläche entweder raumartig oder zeitartig oder isotrop ist) und werden folgenden Satz beweisen: Zwei derartige Hyperflächen mit Normalvektoren verschiedenen Charakters müssen sich notwendig schneiden.

Um konkret argumentieren zu können, wollen wir den Fall einer glatten, überall zeitartigen Hyperfläche  $S$  und einer glatten Nullfläche  $\Sigma$  betrachten (Abb. 3). Der folgende Beweis läßt sich dann ohne weiteres auf die andern möglichen Kombinationen von Hyperflächen übertragen. Wir werden unseren Satz dadurch beweisen, daß wir annehmen, daß die Flächen  $S$  und  $\Sigma$  der Abb. 3 überhaupt keinen gemeinsamen Punkt besitzen und dann zeigen, daß diese Annahme zu einem Widerspruch führt.

Von der Fläche  $S$  ausgehend, errichten wir ein auf  $S$  basierendes Gaußsches Koordinatensystem in der Weise, daß in ihm die Hyperfläche  $S$  die Gleichung  $x^1 = 0$  hat, während die Parameterkurven von  $x^1$  raumartige geodätische Linien sind, die die zeitartige Hyperfläche  $S$  orthogonal schneiden<sup>17)</sup>. Die Gleichung

$$x^1 = \text{const} \equiv b \quad (11)$$

<sup>16)</sup> Man überlegt sich leicht an Hand des Minkowskischen Raums, daß jede überall raumartige Hyperfläche in allen drei unabhängigen Richtungen offen sein muß, während eine zeitartige Hyperfläche in den beiden auf ihr gelegenen unabhängigen raumartigen Richtungen geschlossen sein kann.

<sup>17)</sup> L. P. Eisenhart, I. c. Anm. 9, S. 57-59.

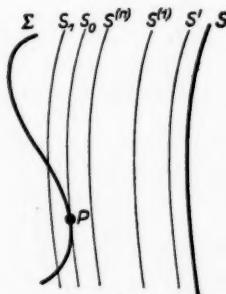


Abb. 3

bestimmt dann eine Hyperfläche  $S'$  (Abb. 3), die ebenfalls zeitartig und (mindestens für kleine Werte von  $b$ ) glatt ist und bei passender Wahl des Vorzeichens von  $b$  näher an der Fläche  $\Sigma$  liegt als die ursprüngliche Fläche  $S$ . Wenn das benutzte Gaußsche Koordinatensystem bis zu genügend großen Werten der Konstante  $b$  verwendet werden kann, werden wir mit seiner Hilfe eine Schar von glatten zeitartigen, zu  $S$  geodätisch parallelen Flächen konstruieren können, die auch eine Fläche  $S_1$  enthält, welche die Fläche  $S$  schneidet (Abb. 3).

Das Gaußsche Koordinatensystem bricht aber im allgemeinen dort zusammen, wo sich die zur Ausgangsfläche  $S$  senkrechten geodätischen Linien, d. h. die Parameterkurven von  $x^1$ , schneiden. Die Gaußsche Konstruktion führt dann zu einer caustischen Fläche  $S_K$ , die die Grenze der Verwendbarkeit des Gaußschen Koordinatensystems darstellt. Es kann nun vorkommen, daß die Fläche  $S_K$  so nahe an der Ausgangsfläche  $S$  liegt, daß wir unter Verwendung des auf  $S$  basierenden Gaußschen Koordinatensystems keine Fläche von der Art  $S_1$  konstruieren können. Liegt nun z. B. die Fläche  $S''$  so nahe an der caustischen Fläche  $S_K$ , daß sie zwar noch glatt ist, aber schon Stellen starker Krümmung besitzt, so können wir sie zunächst an diesen Stellen glätten. Diese Glättung erfolgt dadurch, daß wir die stark gekrümmten Bereiche der Hyperfläche  $S''$  kontinuierlich durch andere ersetzen, die ebenfalls zeitartig sind, aber eine geringere Krümmung aufweisen. Auf der nach dieser Modifizierung entstandenen glatten zeitartigen Fläche  $S^{(1)}$  basieren wir dann ein neues Gaußsche Koordinatensystem, in dem jetzt  $S^{(1)}$  die Gleichung  $x^1 = 0$  bekommt und können so mit der Konstruktion der Schar von glatten zeitartigen Hyperflächen weiter in Richtung von  $\Sigma$  forschreiten.

Wenn wir auch mit Hilfe dieses zweiten Gaußschen Koordinatensystems nicht bis zu einer Fläche der Art  $S_1$  gelangen können, werden wir den geschilderten Prozeß erneut wiederholen. Da die geodätische Entfernung zwischen der ursprünglichen zeitartigen Fläche  $S$  und der Nullfläche  $\Sigma$  endlich ist, werden wir nach einer endlichen Wiederholung dieses Prozesses zu einer geglätteten zeitartigen Hyperfläche  $S^{(n)}$  gelangen, die so nahe an  $\Sigma$  liegt, daß das auf ihr basierende Gaußsche Koordinatensystem zwischen  $S^{(n)}$  und  $\Sigma$  keine caustische Fläche besitzt, so daß wir von  $S^{(n)}$  ausgehend mit Hilfe des Gaußschen Verfahrens zu einer Fläche der Art  $S_1$  gelangen können.

Die Fläche  $S_1$  schneidet die Fläche  $\Sigma$ , während  $S^{(n)}$  mit  $\Sigma$  voraussetzungsgemäß keinen gemeinsamen Punkt besitzen soll. Demnach muß die Schar der zu  $S^{(n)}$  geodätisch parallelen glatten zeitartigen Flächen, die zwischen  $S^{(n)}$  und  $S_1$  liegt, eine Fläche  $S_0$  enthalten, die die Fläche  $\Sigma$  an einem Punkt  $P$  tangiert<sup>18)</sup> (Abb. 3). An diesem Punkt werden also die Flächen  $S_0$  und  $\Sigma$  — die ja als glatte Flächen vorausgesetzt wurden — denselben Normalvektor besitzen müssen. Dieser Vektor muß nun aber als Normalvektor der zeitartigen Fläche  $S_0$  ein raumartiger, hingegen als Normalvektor von  $\Sigma$  ein isotroper Vektor sein.

Somit führt die Annahme, daß die glatte zeitartige Hyperfläche  $S$  mit einer glatten Nullhyperfläche  $\Sigma$  keinen gemeinsamen Punkt besitzt, zu einem Widerspruch. Wir haben damit unseren Satz bewiesen.

<sup>18)</sup> Die weitere Beweisführung gilt auch für den Fall, daß der Punkt  $P$  im Unendlichen liegt, daß also die Fläche  $S_0$  asymptotisch zu  $\Sigma$  verläuft.

Unser Satz erlaubt ohne weiteres noch die beiden folgenden einfachen Verallgemeinerungen:

1. Es ist nicht nötig, sich auf überall glatte Nullhyperflächen zu beschränken: Unser Satz gilt auch für (ganze) einheitliche Nullflächen mit konischen Punkten. Dies folgt unmittelbar aus der Bemerkung, daß der Punkt  $P$  auf der Abb. 3 kein konischer Punkt sein kann (in welchem Fall die Nullfläche an  $P$  keinen Normalvektor hätte und daher der obige Widerspruch beseitigt sein würde).

Denn wäre  $P$  ein konischer Punkt  $P_K$ , so hätte man auch den auf Abb. 4 gestrichelt gezeichneten Teil von  $\Sigma$  zu berücksichtigen, um die ganze einheitliche Nullfläche  $\Sigma$  zu bekommen. Dann gäbe es aber notwendig zu  $S^{(n)}$  geodätisch parallele Hyperflächen, die rechts von  $S_0$  liegen und  $\Sigma$  schneiden, wie z. B. die Fläche  $S_2$  auf Abb. 4, im Widerspruch zu der Annahme, daß  $S_0$  die erste Fläche der Schar ist, die  $\Sigma$  schneidet.

2. An Stelle von glatten raum- oder zeitartigen Hyperflächen können in unserem Theorem ersichtlich auch Hyperflächen mit endlich vielen Kanten treten, wenn sie nur so beschaffen sind, daß man durch Glättung der Kanten daraus glatte Flächen erhalten kann, die überall raum- oder überall zeitartig sind<sup>19)</sup>.

#### 4. Folgerungen bezüglich der Existenz von zeitlich periodischen singularitätsfreien Feldern

Wir haben im § 2 gesehen, daß zeitlich periodische singularitätsfreie Lösungen der Einsteinschen Gravitationsgleichungen, die die Grenzbedingung (3) erfüllen, nur dann existieren können, wenn es eine einheitliche Nullhyperfläche  $\Sigma$  gibt, die ganz innerhalb des Bereichs  $r < a$  verläuft, also keinen gemeinsamen Punkt mit der glatten zeitartigen Hyperfläche  $r = a$  besitzt. Nach dem im § 3 hergeleiteten geometrischen Theorem kann es aber keine derartige Nullhyperfläche geben. Hieraus folgt unmittelbar, daß es keine periodischen singularitätsfreien Lösungen von (1) gibt, welche (3) befriedigen. – Da nach Lichnerowicz auch keine nichttrivialen stationären Lösungen dieser Art existieren, so folgt, daß die allgemeine Relativitätstheorie kein Modell eines beständigen Teilchens, das nur aus dem Gravitationsfeld aufgebaut ist, erlaubt.

Das im § 3 abgeleitete geometrische Theorem über einheitliche Nullhyperflächen ermöglicht auch die Beantwortung der Frage nach der Existenz von zeitlich periodischen singularitätsfreien Lösungen der Einstein-Maxwellschen Feldgleichungen

$$R_{\mu\nu} = F_{\mu\sigma} F_{\nu}^{\sigma} - \frac{1}{4} g_{\mu\nu} F_{\sigma\tau} F^{\sigma\tau}, \quad (12a)$$

$$(\sqrt{-g} F^{\sigma\tau})_{,\tau} = 0. \quad (12b)$$

<sup>19)</sup> Eine Nullhyperfläche mit Kanten setzt sich notwendig aus verschiedenen einheitlichen Nullflächen zusammen. Eine Glättung der Kanten derart, daß dadurch eine glatte und somit einheitliche Nullfläche entsteht, ist daher unmöglich.

Hierbei ist  $F_{\mu\nu} = A_{\nu,\mu} - A_{\mu,\nu}$  und  $A_\mu$  das elektromagnetische Potential. Für  $g_{\mu\nu}$  wird wiederum die Grenzbedingung (3) gefordert. Ferner sollen auch hier  $g_{\mu\nu}$  und  $A_\mu$  wesentlich periodisch sein und nicht nur scheinbar von der Zeit abhängen. D. h. es soll nicht möglich sein, durch Koordinaten- und Eichtransformationen die Größen  $g_{\mu\nu}$  und  $A_\mu$  auf eine zeitunabhängige Form zu bringen.

Bei diesem Problem wird man ähnlich wie im Fall des reinen Gravitationsfeldes vorgehen: Nach Papapetrou<sup>20)</sup> kann auch das kombinierte Einstein-Maxwellsche Feld in dem räumlich unendlichen Bereich  $r \geq a$ , in dem das Gravitationsfeld als Folge der Grenzbedingung notwendig schwach ist, nicht von der Zeit abhängen. Eine periodische Zeitabhängigkeit des kombinierten Feldes wäre also nur in demjenigen Gebiet des Innenbereichs  $r < a$  möglich, in dem das Gravitationsfeld stark ist. Hieraus folgt aber wiederum, daß es eine Hyperfläche  $\Sigma$  geben muß, auf der gewisse Ableitungen von  $g_{\mu\nu}$  und  $A_\mu$  Sprünge besitzen. Weil eine wesentliche Periodizität von  $g_{\mu\nu}$  und  $A_\mu$  bestehen soll, dürfen diese Sprünge nicht durch Koordinaten- oder Eichtransformationen eliminierbar sein.

Die Forderung, daß die Feldgleichungen (12) im ganzen Raum, also auch auf der Sprungfläche  $\Sigma$ , gültig sind, ist nun wieder eine stark einschränkende Bedingung für die Möglichkeit von nichtforttransformierbaren Sprüngen. Für den Fall, daß die niedrigsten unstetigen Ableitungen von  $g_{\mu\nu}$  und  $A_\mu$  die zweiten oder höheren Ableitungen sind, hat Stellmacher<sup>10)</sup> gezeigt, daß auch hier, wie im Fall des reinen Gravitationsfeldes, die Sprungfläche  $\Sigma$  eine Nullfläche sein muß. Nach Papapetrou und Treder<sup>10)</sup> sind nichtforttransformierbare Unstetigkeiten der ersten Ableitungen von  $g_{\mu\nu}$  und  $A_\mu$  ebenfalls nur an Nullflächen möglich. Wie beim reinen Gravitationsfeld dürften schließlich auch im Fall des kombinierten Feldes Unstetigkeiten der Potentiale  $g_{\mu\nu}$  und  $A_\mu$  mit den Gleichungen (12) und der Forderung der Regulärheit der Metrik nicht vereinbar sein<sup>21)</sup>.

Die Sprungfläche  $\Sigma$  muß auch wieder eine einheitliche Nullfläche sein. Dies ergibt sich unmittelbar daraus, daß auch in der kombinierten Einstein-Maxwellschen Theorie ein skalarer Erhaltungssatz für die Sprungerregung des Gesamtfeldes

$$E + 4 J = \gamma_{\mu\nu} \gamma^{\mu\nu} - 4 \varphi_\mu \varphi^\mu \quad (13)$$

gilt:

$$(\sqrt{-g} (E + 4 J) p^\mu)_{,\mu} = 0. \quad (14)$$

In diesen Formeln haben  $\gamma_{\mu\nu}$  und  $p_\mu$  dieselbe Bedeutung wie zuvor, während  $\varphi_\mu$  den Sprungvektor von  $A_\mu$  bedeutet.  $E + 4 J$  ist wieder positiv definit in dem Sinne, daß aus  $E + 4 J = 0$  das Verschwinden der nichtforttransformierbaren Teile von  $\gamma_{\mu\nu}$  und  $\varphi_\mu$  folgt. Aus (14) ergibt sich wieder, genauso wie früher aus (9), daß die Sprungerregung auf einer auf  $\Sigma$  liegenden geodätschen Nulllinie nirgends verschwindet, wenn sie an einem Punkt dieser Linie

<sup>20)</sup> A. Papapetrou, Ann. Physik (7) 1, 186 (1958).

<sup>21)</sup> Wie man sich im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie leicht überlegt, hat eine nichtforttransformierbare Unstetigkeit von  $A_\mu$  zur Folge, daß auf der Sprungfläche  $\Sigma$  nicht nur die elektromagnetische Energiedichte, sondern auch die Gesamtenergie des elektromagnetischen Feldes unendlich groß wird. Eine unendliche Gesamtenergie wird aber in der allgemeinen Relativitätstheorie notwendig zu nichtregulären  $g_{\mu\nu}$  führen.

ungleich Null ist. Die Sprungfläche  $\Sigma$  muß also jede auf ihr liegende geodätische Nulllinie als Ganzes enthalten und somit eine einheitliche Nullfläche sein.

Da diese einheitliche Nullfläche  $\Sigma$  wieder ganz innerhalb des Bereichs  $r < a$  verlaufen muß, darf sie mit der glatten und gemäß der Grenzbedingung (3) zeitartigen Hyperfläche  $r = a$  keinen gemeinsamen Punkt besitzen. Nach dem Theorem des § 3 ist dies aber nicht möglich. Es gibt somit keine zeitlich periodischen singularitätsfreien Lösungen der Einstein-Maxwellschen Feldgleichungen (12), die die Grenzbedingung (3) erfüllen.

Es bleibt noch die Frage, ob es stationäre singularitätsfreie Lösungen der Einstein-Maxwellschen Feldgleichungen gibt, die die Grenzbedingung (3) erfüllen. Diese Frage wurde aber schon durch die Arbeiten von Thiry und Lichnerowicz<sup>22)</sup> negativ beantwortet. Wie in der Einsteinschen Theorie des reinen Gravitationsfeldes existieren demnach auch in der Einstein-Maxwellschen Theorie des kombinierten Gravitations- und elektromagnetischen Feldes keine Lösungen, die Modelle von beständigen Teilchen darstellen können.

Das Theorem des § 3 entscheidet übrigens auch dann über die Existenz von zeitlich periodischen Lösungen der Einsteinschen Gravitationsgleichungen oder der Einstein-Maxwellschen Gleichungen des kombinierten Feldes, wenn im Innenbereich  $r < a$  periodisch bewegte Quellen des Feldes (in Form von Singularitäten oder von genügend kleinen Körpern) existieren. Auch in diesem Fall gilt nämlich nach Papapetrou<sup>20)</sup>, daß das Feld im Außengebiet  $r \geq a$  zur Erfüllung der Grenzbedingung (3) notwendig stationär sein muß. Es muß also eine im Endlichen des gewöhnlichen dreidimensionalen Raumes verlaufende Sprungfläche  $\Sigma$  existieren, die das periodisch zeitabhängige innere Feld vom stationären singularitätsfreien Außenfeld trennt.

Da der  $V_4$  außerhalb des von der Sprungfläche  $\Sigma$  umschlossenen räumlich endlichen Gebiets eine reguläre Metrik besitzt, kann nach dem Theorem des § 4 die Fläche  $\Sigma$  — da sie die zeitartige Hyperfläche  $r = a$  nicht trifft — keine einheitliche Nullfläche sein. Daher wird es bei einem solchen Feld außer den sich im Innern von  $\Sigma$  bewegenden Singularitäten (bzw. kleinen Körpern) auch auf  $\Sigma$  selbst flächenhaft verteilte Quellen des Feldes geben müssen. Es liegen dann ähnliche Verhältnisse vor wie bei dem aus der Theorie des reinen Maxwellschen Feldes bekannten Fall, wo außerhalb einer geschlossenen dünnen leitenden (metallischen) Schicht ein zeitunabhängiges Feld existieren kann, während sich im Innern geladene Körper beliebig bewegen dürfen. Für das reine Gravitationsfeld ist ein solches Feld von Marder angegeben worden<sup>23)</sup>. Allerdings handelt es sich dabei um ein axialsymmetrisches Feld, welches in der Richtung der Symmetrie-Achse unendlich ausgedehnt ist, die Grenzbedingung (3) also nicht erfüllt.

Schließt man dagegen jede flächenhafte Quellenverteilung aus, so folgt aus der vorigen Überlegung, daß es kein die Grenzbedingung (3) erfüllendes, von periodisch bewegten räumlich verteilten Quellen (Singularitäten oder

<sup>22)</sup> Y. Thiry, J. Math. pures et appliquées (9) **30**, 275 (1951); A. Lichnerowicz, l. c. Anm. 6, S. 227—231. Die in diesem Beweis verwendete zusätzliche Forderung, daß die elektromagnetische Feldstärke  $F_{\mu\nu}$  im Unendlichen mindestens wie  $r^{-2}$  verschwindet, ist als unabhängige Annahme nicht notwendig, da sie aus den Gravationsgleichungen (12a) und der Grenzbedingung (3) folgt.

<sup>23)</sup> L. Marder, Proc. Roy. Soc. London (A) **246**, 133 (1958).

kleinen Körpern) erzeugtes reines Gravitations- oder kombiniertes Einstein-Maxwellsches Feld geben kann. Dieses Ergebnis scheint uns die reale Existenz von energietragenden Gravitationswellen überzeugend zu beweisen<sup>24)</sup>.

Unsere Resultate schließen natürlich nicht die Existenz von Modellen beständiger Teilchen in anderen Feldtheorien aus, in denen z. B. das Einsteinsche Gravitationsfeld (mit symmetrischem  $g_{\mu\nu}$ ) mit einem Feld gekoppelt ist, das nicht das Maxwellsche Feld ist. Insbesondere erscheint es wichtig zu prüfen, ob in Einsteins Feldtheorie mit unsymmetrischem  $g_{\mu\nu}$  derartige Teilchenmodelle möglich sind. Dies erfordert die Untersuchung der Frage, ob Einsteins unsymmetrische Feldgleichungen<sup>25)</sup>

$$\begin{aligned} g_{\mu\nu; \lambda} &= 0, & g^{\mu\nu}_{\nu; \nu} &= 0; \\ R_{\mu\nu} &= 0, & R_{\mu\nu} &= \Gamma_{\mu,\nu} - \Gamma_{\nu,\mu} \end{aligned} \quad (15)$$

zeitunabhängige oder zeitlich periodische singularitätsfreie Lösungen  $g_{\mu\nu}$  besitzen. Dabei wäre man geneigt, folgende Verallgemeinerung der Grenzbedingung (3) zu fordern<sup>26)</sup>:

$$g_{\mu\nu} \rightarrow \eta_{\mu\nu} \text{ und } g_{\mu\nu} \rightarrow 0 \text{ für } r \rightarrow \infty. \quad (16)$$

Es ist nun zwar nicht geklärt, ob es nichttriviale stationäre singularitätsfreie Lösungen von (15) gibt, die die Bedingung (16) erfüllen<sup>27)</sup>. Jedoch würden auch diese Lösungen — wenn sie überhaupt existieren — keine physikalisch verwendbaren Teilchenmodelle ergeben, da für die Gesamtenergie eines derartigen Feldes wiederum das Theorem von Einstein und Pauli gilt<sup>28)</sup>. Auch in der unsymmetrischen Feldtheorie ist die Gesamtenergie eines stationären Feldes nämlich durch

$$J_0 = \int_{x^0 = \text{const}} (\mathfrak{T}_0^0 - \mathfrak{T}_i^i) dV_3 \quad (17)$$

gegeben, wobei jetzt  $\mathfrak{T}_\mu^r$  durch Schrödingers<sup>29)</sup> Beziehung

$$\mathfrak{T}_\mu^r = \frac{1}{2} (g^{\sigma\nu} T_{\sigma\mu} + g^{\nu\sigma} T_{\mu\nu})$$

definiert ist und  $T_{\mu\nu}$  die Bedeutung

$$T_{\mu\nu} = -R_{\mu\nu} + \frac{1}{2} g_{\mu\nu} g^{\sigma\tau} R_{\sigma\tau} + \Gamma_{\mu,\nu} - \Gamma_{\nu,\mu} - g_{\mu\nu} g^{\sigma\tau} \Gamma_{\sigma,\tau}$$

hat. Aus den Feldgleichungen (15) folgt dann das Verschwinden des Materialtensors  $T_{\mu\nu}$  und somit aus (17) das Verschwinden der Gesamtenergie eines stationären singularitätsfreien Feldes auch in der unsymmetrischen Feldtheorie<sup>30)</sup>.

<sup>24)</sup> Vgl. auch D. Geissler, A. Papapetrou u. H. Treder, Ann. Physik (7) **2**, 344 (1959).

<sup>25)</sup> Vgl. A. Einstein, The Meaning of Relativity, London 1951, S. 127–157.

<sup>26)</sup> Vgl. hierzu auch M. Wyman, Canad. J. Math. **2**, 427 (1950).

<sup>27)</sup> Vgl. M. Lenoir, C. R. hebdo. Séances Acad. Sci. **287**, 424 (1953).

<sup>28)</sup> A. Papapetrou, Physic. Rev. **73**, 1105 (1948); vgl. auch A. Einstein, The Meaning of Relativity, Princeton 1955, S. 163.

<sup>29)</sup> E. Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad. (A) **52** (1948).

<sup>30)</sup> Für Teilchen mit verschwindender Ruhmasse gibt es kein Ruhsystem. Sie werden daher nicht durch Lösungen der Feldgleichungen darstellbar sein, die die Grenzbedingung (3) erfüllen.

Dagegen ist es nicht a priori ausgeschlossen, daß die unsymmetrische Theorie Einsteins zeitlich periodische singularitätsfreie Lösungen zuläßt, die die Grenzbedingung (16) erfüllen. Eine dafür notwendige Bedingung läßt sich aus unseren obigen Resultaten sofort herleiten: Die Feldgleichungen (15) sollten Lösungen zulassen, die schon im Bereich des schwachen Feldes zeitlich periodisch sind, im Gegensatz zu der Theorie des reinen symmetrischen bzw. des kombinierten Einstein-Maxwellschen Feldes, wo dies nicht der Fall war. Denn sonst würde auch in der unsymmetrischen Theorie eine Sprungfläche  $\Sigma$  benötigt, die das Gebiet des zeitunabhängigen von dem des periodischen Feldes trennt. Diese Fläche  $\Sigma$  sollte nach den Ergebnissen von Lichnerowicz<sup>31)</sup> über das Cauchysche Problem in der unsymmetrischen Feldtheorie eine Nullhyperfläche der durch

$$a^{\mu\nu} = g^{\mu\nu} \quad \text{und} \quad a_{\mu\nu} a^{\nu\sigma} = \delta_{\mu}^{\sigma}$$

definierten Riemannschen Metrik

$$ds^2 = a_{\mu\nu} dx^{\mu} dx^{\nu} \quad (18)$$

sein. Auf Grund des Theorems des § 3 würden wir dann aber wieder auf die Unmöglichkeit eines solchen Feldes schließen.

Wenn zeitlich periodische singularitätsfreie Lösungen der Feldgleichungen der unsymmetrischen Feldtheorie existieren, dürfte man wohl erwarten, daß diese Lösungen für die Weiterentwicklung des Einsteinschen Teilchenproblems von Bedeutung sein werden.

Herrn Dipl.-Mathematiker W. Prieß danken wir für seine Hilfe bei der Anfertigung des Manuskriptes.

<sup>31)</sup> A. Lichnerowicz, l. c. Anm. 6, S. 275—288.

Berlin, Institut für reine Mathematik der Deutschen Akademie der Wissenschaften.

Bei der Redaktion eingegangen am 16. Januar 1959.

trische  
zuläßt,  
ingung  
nungen  
Feldes  
rischen  
icht der  
ie eine  
rem des  
en von  
rischen

(18)  
auf die  
ungen  
arten,  
lchen-  
ei der

e der

## Über die Elektrophorese in Argon-Quecksilber-Niederdruckentladungen<sup>1)</sup>

Von H. Morgenroth

Mit 16 Abbildungen

### Inhaltsübersicht

In einer mit Gleichspannung betriebenen Argon-Quecksilber-Niederdruckentladung hängen die Hg-Konzentration und die Elektronentemperatur vom Abstand von der Kathode ab. Die entsprechenden Beziehungen konnten formuliert und die gewonnenen Gleichungen durch Intensitäts- und Elektronentemperaturmessungen im wesentlichen bestätigt werden. In einem gesonderten Abschnitt wurde als Anwendung der erzielten Ergebnisse die Elektronenbeweglichkeit für verschiedene Elektronentemperaturen und Quecksilberkonzentrationen berechnet.

Zusammenstellung der in der Arbeit benutzten Zeichen:

Der obere Index (*i*) bezieht sich stets auf das *i*-te Gas. Speziell ist

*i* = 1 Argon, *i* = 2: Quecksilber

*b<sub>e</sub>*, *b<sub>p</sub>* Elektronen-, Ionenbeweglichkeit

*D* Diffusionskoeffizient Quecksilber-Argon

*D<sup>(i)</sup>* Ambipolare Diffusionskoeffizienten

*E<sub>x</sub>* Längsfeldstärke

*f<sub>μν</sub>* =  $f(U_e, U_{μν}, U_{mμν}) = 1$  für  $U_e = 0$  und weicht im allgemeinen nicht viel von diesem Wert ab

*i* Entladungsstrom

*I<sub>νμ</sub>* Intensität einer Linie entsprechend dem Übergang  $ν \rightarrow μ$

*k* definiert durch (2.4)

*k<sub>1</sub>*, *k<sub>2</sub>* definiert durch (2.3)

*n* Konzentration der Neutralgasatome

*n<sub>e</sub>*, *n<sub>p</sub>* Konzentration der Ladungsträger; Zusatzindex 0: Konzentration in der Achse des Rohres

*Q<sub>mμν</sub>* Wirkungsquerschnitt an der Stelle *U<sub>m</sub>*

*R*, *r* Rohrradius, Abstand von der Achse

*s<sub>μν</sub>* =  $\int Q_{μν}(U_e) \cdot v \cdot F(v) \cdot dv$ : Stoßintegral

*U<sub>e</sub>* Elektronentemperatur in eV

*U<sub>μν</sub>* Potentialdifferenz zwischen den Niveaus  $μ$  und  $ν$ . Für das Ionisationspotential steht auch  $U^{(i)}$  an Stelle von  $U_{0\infty}^{(i)}$ .

*U<sub>mμν</sub>* =  $U_m - U_{0\infty}$ , wo  $U_m$  die Anregungsspannung für das Maximum des Wirkungsquerschnittes in der Approximationsfunktion  $Q_{μν}(U_e)$  ist

<sup>1)</sup> Auszug aus der Diplomarbeit des Verf.

$Y(\varrho) = n_e/n_{e0} = n_p/n_{p0}$ :	Trägerverteilung. Ist $Y(\varrho)$ die Besselfunktion, so ist $Y_1 = \int_0^1 Y(\varrho) \cdot 2\varrho \cdot d\varrho$ ein Faktor der Ordnung 1
$\alpha$	definiert durch (1.10)
$\gamma$	Korrekturfaktor des Stoßintegrals bei Berücksichtigung von Stufen- prozessen in der Ionisation, siehe (4.5)
$\delta_{\mu\nu}$	Proportionalitätsfaktor zwischen $I_{\mu\nu}$ und $n$
$\lambda(x)$	definiert durch (1.11)
$\mu_1$	1. Wurzel der Besselfunktion = 2,405
$\varrho$	$r/R$
$\tau$	mittlere Trägerlebensdauer
$\tau_v$	mittlere Lebensdauer des $v$ -ten Anregungszustandes.

## I. Einleitung

In einer mit Gleichstrom betriebenen Argon-Quecksilber-Niederdruckentladung wird nach Ablauf einer gewissen Zeitspanne nach dem Zünden der Entladung in Kathodennähe eine Stauung von Quecksilber beobachtet. Dazu muß die Hg-Konzentration klein gegenüber der Argonkonzentration sein. Der stationäre Zustand stellt ein Gleichgewicht zwischen dem in Richtung zur Kathode fließenden Quecksilberionenstrom und einem entgegengesetzten, gleichgroßen Diffusionsstrom neutraler Quecksilberatome dar. Zu einer qualitativen Erklärung dieser Erscheinung gelangt man unter Beachtung des Konzentrationsunterschiedes und des Unterschiedes in den Ionisationspotentialen für Quecksilber und Argon. Danach ergibt sich für die Quecksilberkomponente ein hoher Ionisationsgrad im Vergleich zu dem des Argons und durch die Driftbewegung der Hg-Ionen im Längsfeld wird ein wesentlich größerer Anteil des gesamten vorhandenen Quecksilbers zur Kathode hin bewegt wie entsprechend beim Argon.

Die erste eingehendere theoretische Untersuchung der Elektrophorese stammt von Druyvesteyn<sup>2)</sup>. Diese Arbeit wurde in der Folgezeit nicht wesentlich weiter entwickelt. Dorgelo, Alting und Boers<sup>3)</sup> berechnen durch Erweiterung der Schottkyschen Diffusionstheorie die Elektronentemperatur in Gasgemischen, jedoch ohne Berücksichtigung des Entmischungseffektes. Unter der gleichen Voraussetzung beschäftigen sich einige Arbeiten mit theoretischen und experimentellen Untersuchungen des Gradienten und der Anregungsverhältnisse in Gasgemischen. Durch Wechselstrombetrieb oder anderweitige Vorsichtsmaßregeln wird stets dafür gesorgt, daß keine Elektrophorese auftritt.

Experimentell wurde die Entmischung in einer Arbeit von Penning<sup>4)</sup> untersucht, in der der von Druyvesteyn für einen Bereich nahe der Kathode berechnete lineare Konzentrationsabfall spektroskopisch gemessen wurde. Eine Anwendung der Elektrophorese wurde von Riesz und Dieke<sup>5)</sup> angegeben. Die Autoren nutzten die bei Gleichstrombetrieb auftretende Entmischung zur Erzielung eines hohen Reinheitsgrades von Gasen aus.

<sup>2)</sup> M. J. Druyvesteyn, *Physica* **2**, 255 (1935).

<sup>3)</sup> H. B. Dorgelo, H. Alting, C. J. Boers, *Physica* **2**, 959 (1935).

<sup>4)</sup> F. H. Penning, *Physica* **1**, 763 (1934).

<sup>5)</sup> R. Riesz, G. H. Dieke, *J. appl. Physics* **25**, I, 196 (1954).

In der theoretischen Behandlung des Effektes wurde von Druyvesteyn nicht beachtet, daß die Elektronentemperatur vom Quecksilbergehalt abhängt, d. h. nach vollzogener Entmischung eine Funktion des Abstandes von der Kathode sein muß. In der vorliegenden Arbeit wird daher versucht, die theoretischen Grundlagen des Effektes in dieser Richtung genauer zu formulieren.

## II. Theorie der Entmischung

### 1. Die Diffusionsgleichung und ihre Integration

Unter der Voraussetzung, daß die Quecksilberkonzentration  $n^{(2)}$  unabhängig vom Abstand von der Rohrachse ist<sup>6)</sup>, ist der Diffusionsstrom durch den Rohrquerschnitt

$$-D \frac{\partial n^{(2)}}{\partial x} \pi R^2. \quad (1.1)$$

Die Dichte des positiven Quecksilberionenstromes ist

$$j(r) = -n_p^{(2)}(r) e_0 b_p^{(2)} E_x.$$

Nach Integration über den Querschnitt und Division durch  $-e_0$  ergibt sich daraus der Teilchenstrom zur Kathode, der dem Diffusionsstrom (1.1) gleichzusetzen ist:

$$-D \frac{\partial n^{(2)}}{\partial x} = n_{p0}^{(2)} b_p^{(2)} E_x Y_1. \quad (1.2)$$

Zur Integration der bereits von Druyvesteyn angegebenen Diffusionsgleichung (1.2) ist die Konzentration der positiven Hg-Ionen  $n_{p0}^{(2)}$  als Funktion von  $n^{(2)}$  darzustellen.

Unter Vernachlässigung von Volumenrekombination und Stufenprozessen ist

$$n_{p0}^{(i)} = n^{(i)} n_{e0} \tau^{(i)} s_{0\infty}^{(i)} \quad (1.3)$$

mit

$$\begin{aligned} s_{\mu\nu}^{(i)} &= A_{\mu\nu}^{(i)} f_{\mu\nu} \sqrt{U_e} e^{-\frac{U_{\mu\nu}^{(i)}}{U_e}}, \\ A_{\mu\nu}^{(i)} &= 1,82 \cdot 10^8 \cdot \frac{Q_{m\mu\nu}^{(i)} U_{\mu\nu}^{(i)}}{U_{m\mu\nu}^{(i)}} \end{aligned} \quad (1.4)$$

als Stoßintegral.

Um einen expliziten Ausdruck für  $\tau^{(i)}$  zu gewinnen, wird angenommen, daß die in der Trägerbilanz auftretenden Ionenströme der Argon- und Quecksilberionen voneinander unabhängig sind und sich analog zum Fall des einheitlichen Gases mit Hilfe gewisser ambipolarer Diffusionskoeffizienten  $D^{(i)}$  darstellen lassen. Dann lautet die Trägerbilanz

$$\left(\frac{\mu_1}{R}\right)^2 n_{p0}^{(i)} D^{(i)} = n_{e0} \tau^{(i)}, \quad (1.5)$$

<sup>6)</sup> Denebenfalls in der Arbeit von Druyvesteyn behandelte Radialeffekt der Elektrophorese wird in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt.

wo  $z^{(i)}$  die Zahl der von einem Elektron in einer sec bewirkten Ionisationen des  $i$ -ten Gases ist. Mit  $z^{(i)} = n^{(i)} s_{0\infty}^{(i)}$  und mit (1.3) ergibt sich daraus

$$\frac{1}{\tau^{(i)}} = \left( \frac{\mu_1}{R} \right)^2 D^{(i)}. \quad (1.6)$$

Von den ambipolaren Diffusionskoeffizienten läßt sich zeigen, daß sie in Analogie zum Fall des einheitlichen Gases in der Form

$$D^{(i)} = b_p^{(i)} U_s \quad (1.7)$$

geschrieben werden können.  $b_p^{(i)}$  stellt dabei die Beweglichkeit der Ionen des  $i$ -ten Gases unter den gegebenen Bedingungen dar, d. h., daß bei kleiner Konzentration der Zusatzkomponente, im vorliegenden Falle Quecksilber, für die Quecksilberionen deren Beweglichkeit in Argon einzusetzen ist. Bei geringen Konzentrationsunterschieden zwischen beiden Gasen müssen die richtigen  $b_p$ -Werte jedoch experimentell ermittelt werden.

Aus den Gln. (1.3), (1.6) und (1.7) folgt für die Konzentration der Quecksilberionen

$$n_{p0}^{(2)} = n^{(2)} n_{e0} s_{0\infty}^{(2)} \frac{1}{b_p^{(2)} \cdot U_s} \left( \frac{R}{\mu_1} \right)^2. \quad (1.8)$$

Drückt man in dieser Gleichung  $n_{e0}$  gemäß

$$i = e_0 n_{e0} b_e E_x Y_1 \pi R^2$$

durch den Entladungsstrom  $i$  aus und geht damit in die Diffusionsgleichung (1.2) ein, so erhält man

$$-D \frac{\partial n^{(2)}}{\partial x} = \frac{n^{(2)} i s_{0\infty}^{(2)}}{e_0 \pi \mu_1^2 b_e U_s}. \quad (1.9)$$

Die Integration von (1.9) läßt sich formal in einfacher Weise durchführen, wenn man die Elektronenbeweglichkeit  $b_e$  als Konstante behandelt. Der dadurch auftretende Fehler ist aber nur für kleine Konzentrationen der Zusatzkomponente klein. Die Abhängigkeit von  $b_e$  von der Elektronentemperatur und der Quecksilberkonzentration wird im letzten Abschnitt noch ausführlicher diskutiert.

Mit den Abkürzungen

$$\alpha = \frac{1}{D e_0 \pi \mu_1^2} \quad (1.10)$$

und

$$\lambda' (x) = \frac{s_{0\infty}^{(2)}}{U_s}, \quad \lambda (x) - \lambda (0) = \int_0^x \frac{s_{0\infty}^{(2)}}{U_s} dx, \quad (1.11)$$

liefert die Integration von (1.9)

$$n^{(2)} (x) = n^{(2)} (0) \exp \left\{ -\frac{\alpha i}{b_e} [\lambda (x) - \lambda (0)] \right\}. \quad (1.12)$$

## 2. Elektronentemperatur

Die explizite Berechnung von (1.12) verlangt die Kenntnis der Elektronentemperatur als Funktion vom Abstand von der Kathode. Nimmt man einschränkend an, daß die Elektronenbeweglichkeit, die Feldstärke und die

tionen  
s  
(1.6)  
sie in  
des  
kleiner  
ksilber,  
t. Bei  
en die  
Queck-  
(1.8)

Elektronenkonzentration nicht von  $x$  abhängen und vernachlässigt man weiterhin den Einfluß der metastabilen Atome beider Gase, so läßt sich für  $U_e(x)$  eine Differentialgleichung angeben, die bei Kenntnis eines Randwertes graphisch gelöst werden kann. Die Einschränkungen können nur bei kleinen Konzentrationen der Zusatzkomponente vertreten werden. Andernfalls müßten die Ausgangsgleichungen durch eine entsprechende Anzahl von Gleichungen ergänzt werden, wodurch die mathematische Behandlung außerordentlich erschwert wird.

(1.7)  
Bestimmungsgleichungen für die Elektronentemperatur sind die Trägerbilanzausdrücke der Form (1.8) für die Ionenkonzentrationen beider Gase, die durch die für den Fall zweier Gase geltenden Quasineutralitätsbedingung

$$n_e = n_p^{(1)} + n_p^{(2)} \quad (2.1)$$

miteinander verknüpft sind. Man erhält nach Kürzung von  $n_e$  und mit (1.12)

$$n^{(1)} \frac{s_{0\infty}^{(1)}}{U_e b_p^{(1)}} \cdot \left( \frac{R}{\mu_1} \right)^2 + n^{(2)}(0) \exp \left\{ -\frac{\alpha i}{b_e} [\lambda(x) - \lambda(0)] \right\} \frac{s_{0\infty}^{(2)}}{U_e b_p^{(2)}} \left( \frac{R}{\mu_1} \right)^2 = 1. \quad (2.2)$$

Schreibt man die Stoßwahrscheinlichkeiten nach (1.4) aus und setzt

$$k_1 = \frac{n^{(1)} A_{0\infty}^{(1)} f_{0\infty}^{(1)} R^2}{\mu_1^2 b_p^{(1)}}, \quad k_2 = \frac{n^{(2)}(0) A_{0\infty}^{(2)} f_{0\infty}^{(2)} R^2}{\mu_1^2 b_p^{(2)}}, \quad \sqrt{U_e} = 1, \quad (2.3)$$

so führt (2.2) zu

$$k_2 \exp \left\{ -\frac{\alpha i}{b_e} [\lambda(x) - \lambda(0)] - \frac{U^{(2)}}{U_e} \right\} = U_e - k \exp \left\{ -\frac{U^{(1)}}{U_e} \right\}.$$

Durch Logarithmierung und nachfolgender Differentiation nach  $x$  ergibt sich daraus

$$-\frac{\alpha i}{b_e} \lambda'(x) + \frac{U^{(2)}}{U_e} U'(x) = \frac{U'_e(x) - k_1 \left( \frac{U^{(1)}}{U_e^2} \right) \exp \left\{ -\frac{U^{(1)}}{U_e} \right\} U'_e(x)}{U_e - k_1 \exp \left\{ -\frac{U^{(1)}}{U_e} \right\}},$$

und schließlich mit

$$\lambda'(x) = \frac{A_{0\infty}^{(2)} f_{0\infty}^{(2)} \exp \left\{ -\frac{U^{(2)}}{U_e} \right\}}{U_e} = \frac{k \exp \left\{ -\frac{U^{(2)}}{U_e} \right\}}{U_e} \quad (2.4)$$

der Ausdruck

$$\begin{aligned} -\frac{\alpha i}{b_e} k \cdot \exp \left\{ -\frac{U^{(2)}}{U_e} \right\} + \frac{U^{(2)}}{U_e} U'_e(x) &= U'_e(x) \frac{1 - k_1 \frac{U^{(1)}}{U_e^2} \exp \left\{ -\frac{U^{(1)}}{U_e} \right\}}{1 - \frac{k_1}{U_e} \exp \left\{ -\frac{U^{(1)}}{U_e} \right\}} \quad (2.5) \\ &= \frac{U'_e(x)}{U_e} \cdot g[U_e(x)]. \end{aligned}$$

Die Funktion  $g [U_e(x)]$  ist nach einigen Umformungen darstellbar in der Form

$$g^* \left( \frac{U^{(1)}}{U_e} \right) = \frac{C - \left( \frac{U^{(1)}}{U_e} \right)^2 \exp \left\{ - \frac{U^{(1)}}{U_e} \right\}}{C - \frac{U^{(1)}}{U_e} \exp \left\{ - \frac{U^{(1)}}{U_e} \right\}}; \quad C = \frac{U^{(1)}}{k_1}. \quad (2.6)$$

Mit (2.6) lautet die gesuchte Differentialgleichung für  $U_e(x)$  endgültig

$$U'_e(x) = \frac{\frac{\alpha i}{b_e} \cdot k \cdot \exp \left\{ - \frac{U^{(2)}}{U_e} \right\}}{\frac{U^{(2)}}{U_e} - g^* \left( \frac{U^{(1)}}{U_e} \right)}. \quad (2.7)$$

Aus (2.6) geht hervor, daß die Funktion  $g^*$  für kleine  $U_e$  nicht viel von 1 abweicht. Für größere  $U_e$  nähert sich  $g^*$  der Null, um von dort sehr rasch zu hohen negativen Werten überzugehen. Damit bleibt der Nenner von (2.7) stets positiv. Für

$$\frac{U^{(1)}}{U_e} \exp \left\{ - \frac{U^{(1)}}{U_e} \right\} \rightarrow C \quad (2.8)$$

geht  $g^* \rightarrow -\infty$ , daher  $U'_e(x) \rightarrow 0$ . Aus (2.8) geht hervor, daß es sich dabei um die Stelle handelt, an der nur noch Atome des Gases (1), also des Grundgases vorhanden sind:

$$C = \frac{U^{(1)}}{k_1} = \frac{b_p^{(1)} U^{(1)} \mu_1^2}{n^{(1)} A_{0\infty}^{(1)} f_{0\infty}^{(1)} R^2} = \frac{U^{(1)}}{U_e} \exp \left\{ - \frac{U^{(1)}}{U_e} \right\}.$$

Dies ist bis auf den Faktor  $\sqrt{U_e}$  genau die Trägerbilanz des Gases (1).

Eine entsprechende Abgrenzung auf der Kathodenseite findet man nicht, da sich  $U_e$  so lange ändert, wie die Zusatzkomponente  $n^{(2)}$  sich ändert. Dies ist zunächst bis zur Begrenzung der positiven Säule durch die Kathode der Fall. Steigt  $n^{(2)}$  allerdings über eine gewisse kritische Konzentration hinaus an, so wird die Entladung vollkommen von den Atomen der Zusatzkomponente getragen. Die Voraussetzungen für das Bestehen der Diffusionsgleichung sind nicht mehr erfüllt und der Entmischungsvorgang bricht ab. Damit trifft dann auch die Gl. (2.7) nicht mehr zu, aus der hervorgeht, daß  $U'_e = 0$  erst für  $U_e = 0$  ist.

Die Gl. (2.7) läßt sich graphisch auswerten, indem man das durch die rechte Seite gegebene Richtungsfeld zeichnet. In dieses Richtungsfeld ist die gesuchte Kurve derart einzupassen, daß sie durch einen Anknüpfungspunkt verläuft, der in Form einer Randbedingung ermittelt werden muß. Dazu muß an einer Stelle des Rohres die Konzentration der Zusatzkomponente bekannt sein, was experimentell leicht verwirklicht werden kann. Mittels der so gewonnenen Elektronentemperaturkurven findet man nach (1.12) den Konzentrationsverlauf der Zusatzkomponente in der Längsachse des Entladungsrohres.

### 3. Anregung und Intensitätsverlauf

Unter der Voraussetzung, daß nur Direktanregung erfolgt, gilt für die Intensität einer Linie, die dem Übergang  $\nu \rightarrow \mu$  eines Atoms des Gases (i)

in der

entspricht, die Proportionalitätsbeziehung

(2.6) 
$$I_{\nu \mu}^{(i)} \sim n^{(i)} n_e s_{0 \nu}^{(i)} \quad (3.1)$$

oder, da  $s_{0 \nu} \sim \exp \left\{ \frac{U_{0 \nu}}{U_e} \right\}$  ist,

(2.7) 
$$I_{\nu \mu}^{(i)} \sim n^{(i)} n_e \exp \left\{ - \frac{U_{0 \nu}^{(i)}}{U_e} \right\}. \quad (3.2)$$

Diese Gleichung stellt die theoretische Grundlage für die Bestimmung des Konzentrationsverlaufes aus Intensitäts- und Elektronentemperaturmessungen dar. Mit einem Proportionalitätsfaktor  $\delta_{\nu \mu}$  folgt aus (3.2) für konstantes  $n_e$

(2.8) 
$$n^{(i)} = \delta_{\nu \mu}^{(i)} I_{\nu \mu}^{(i)} \exp \left\{ \frac{U_{0 \nu}^{(i)}}{U_e} \right\}. \quad (3.3)$$

Für kleine Beimengungen dürfte (3.3) trotz der Näherung  $n_e = \text{const}$  gut sein.Für die Überlegungen bezüglich der Elektronenbeweglichkeit wird noch die Änderung von  $n^{(2)}$  benötigt. Durch Differentiation nach  $x$  folgt aus (3.3)

(2.9) 
$$\frac{\partial n^{(2)}}{\partial x} = \delta_{\nu \mu}^{(2)} \left[ I_{\nu \mu}^{(2)'} \cdot \exp \left\{ \frac{U_{0 \nu}^{(2)}}{U_e} \right\} - I_{\nu \mu}^{(2)} \frac{U_{0 \nu}^{(2)}}{U_e^2} \exp \left\{ \frac{U_{0 \nu}^{(2)}}{U_e} \right\} \cdot U_e' \right]. \quad (3.4)$$

Der Proportionalitätsfaktor lässt sich leicht ermitteln, wenn wenigstens an einer Stelle des Rohres die gesuchte Konzentration bereits bekannt ist. Mit  $I_{\nu \mu}$  und  $U_e$  an dieser Stelle ergibt sich  $\delta_{\nu \mu}$ .

#### 4. Stufenprozesse

In den bisherigen Überlegungen sind Stufenprozesse nicht berücksichtigt worden. Bei genügend hohen Gasdichten und Elektronenkonzentrationen muß man jedoch mit dem Auftreten solcher Prozesse rechnen. Quantitative Berechnungen stoßen auf große Schwierigkeiten, da die Lebensdauern und die Anregungs- bzw. Ionisationsquerschnitte der Zwischenstufen nur ungenügend oder gar nicht bekannt sind. Die folgenden Rechnungen geben lediglich die Möglichkeit zu entscheiden, ob in einem gegebenen Fall an einer gegebenen Stelle des Rohres zur Erklärung der dort gemessenen Elektronentemperaturen Stufenprozesse herangezogen werden müssen.

Gesucht ist die Erweiterung des Ausdrückes (1.3) unter der Annahme gleichzeitig auftretender Direktionisation und Ionisation über ein bestimmtes Niveau  $\mu$ . Volumenrekombination wird nicht berücksichtigt. In diesem speziellen Fall reduziert sich der von Ludwig<sup>7)</sup> angegebene allgemeine Ausdruck für die Besetzung des  $\nu$ -ten Zustandes im realen Plasma auf den Ausdruck

(4.1) 
$$n_{\nu} = n n_e \tau \left( s_{0 \infty} + s_{\mu \infty} \frac{n_{\mu}}{n} \right)$$

mit

(4.2) 
$$\frac{n_{\mu}}{n} = \frac{n_e \tau s_{0 \mu}}{1 + n_e \tau_{\mu} B_{0 \mu}}.$$

7) E. H. Ludwig, Z. angew. Physik 5, 377, 421 (1953).

Durch den Nenner in (4.2) ist den Stößen 2. Art im  $\mu$ -ten angeregten Zustand Rechnung getragen. Setzt man

$$s_{0\infty} = a \exp\left\{-\frac{U_{0\infty}}{U_e}\right\}, \quad s_{\mu\infty} = b \exp\left\{-\frac{U_{\mu\infty}}{U_e}\right\}, \quad s_{0\mu} = c \exp\left\{-\frac{U_{0\mu}}{U_e}\right\}$$

und beachtet

$$s_{0\mu} s_{\mu\infty} = b \cdot c \cdot \exp\left\{-\frac{U_{0\mu} - U_{\mu\infty}}{U_e}\right\} = b c \exp\left\{-\frac{U_{0\infty}}{U_e}\right\},$$

so folgt

$$n_p = n n_e \tau s_{0\infty} \left[ 1 + \frac{\frac{b c}{a} n_e \tau}{1 + n_e \tau \mu B_{0\mu}} \right], \quad (4.3)$$

$a$ ,  $b$  und  $c$  hängen nur schwach von  $U_e$  ab. Damit ist auch  $B_{0\mu} = c \frac{g_0}{g_\mu}$ , wo

$\frac{g_0}{g_\mu}$  das Verhältnis der statistischen Gewichte für die Niveaus 0 und  $\mu$  ist, annähernd konstant und der Klammerausdruck hängt merklich nur von der Elektronenkonzentration ab:

$$n_p = n n_e \tau s_{0\infty} \gamma(n_e). \quad (4.4)$$

Für kleine Änderungen von  $n_e$  darf  $\gamma$  als Korrekturfaktor behandelt werden, der insbesondere an den Betrachtungen in den Abschnitten 1 und 2 nichts ändert.  $\gamma > 1$  weist auf Stufenprozesse der vorausgesetzten Form hin.

Entsprechendes gilt auch für Stufenanregungen. Eine nähere Betrachtung zeigt, daß man den dabei auftretenden Korrekturfaktor mit der in Abschnitt 3 bereits angeführten Konstanten  $\delta_{\mu}$  zusammenfassen kann. Da es sich in der vorliegenden Arbeit nur um relative Intensitätsmessungen handelt, interessiert der Faktor jedoch ohnehin nicht.

### 5. Zusammenfassung

Die in den Abschnitten 1 und 2 gewonnenen Gleichungen (1.12) und (2.7) stellen ein simultanes Gleichungssystem für den Verlauf der Konzentration der Zusatzkomponente als Funktion vom Abstand von der Kathode des Entladungsrohres dar. Die Lösung der Gleichungen läßt sich mit Hilfe der bekannten Ionisationsquerschnitte der beteiligten Gase sowie der Ionenbeweglichkeiten für einen speziellen Fall (Strom, Sattdampfdruck und Druck des Grundgases gegeben) graphisch ermitteln. Aus den gewonnenen Abhängigkeiten  $n^{(2)} = n^{(2)}(x)$  und  $U_e = U_e(x)$  läßt sich ferner der Gang der Intensität einer Linie entsprechend dem Übergang  $\nu \rightarrow \mu$  für beide Gase errechnen. Die entsprechenden Kurven erscheinen zusammen mit den Meßergebnissen im experimentellen Teil der Arbeit.

### III. Experimentelle Ergebnisse und Vergleiche

#### 6. Versuchsanordnung

Die Daten des Entladungsrohres sind der Abb. 1 zu entnehmen. Während des Betriebes wurde in der Umgebung des Rohres eine Temperatur von  $75^\circ C$  aufrechterhalten. Dadurch wurden Quecksilberniederschläge im Inneren des Rohres, insbesondere in den Totvolumina, vermieden. Das Rohr  $c$  stellt die

Verbindung des Quecksilbervorrates mit dem Entladungsrohr her. Der Quecksilbervorrat diente zur Abtrennung des Entladungsrohres von der Pumpenanlage und gleichzeitig zur Erzeugung des gewünschten Quecksilber-

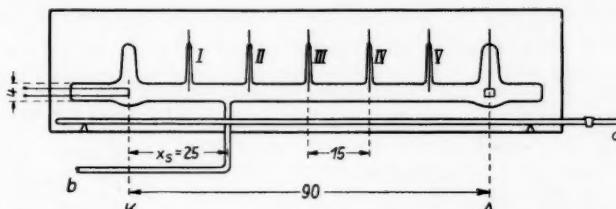


Abb. 1. Entladungsrohr. *A*: Anode (Molybdänblechzylinder), *K*: Kathode (Bariumoxydkathode, Heizstrom etwa 8 A), *a*: gegabeltes Heizrohr, *b*: Verbindungsrohr zur Pumpe bzw. zum Quecksilbervorrat, *I* bis *V*: unbewegliche Zylindersonden

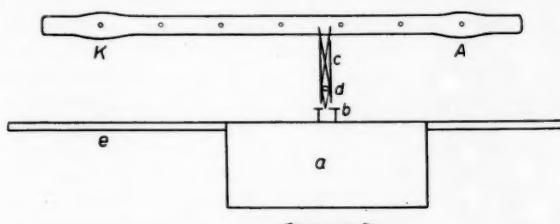


Abb. 2. Anordnung des Spektrographen vor dem Rohr. *a*: Spektrograph, *b*: Spaltkopf, *c*: Tubus von 3 em Durchmesser zur Ausblendung eines kurzen Abschnittes der positiven Säule, *d*: Abbildungslinse, *e*: Führungsschiene

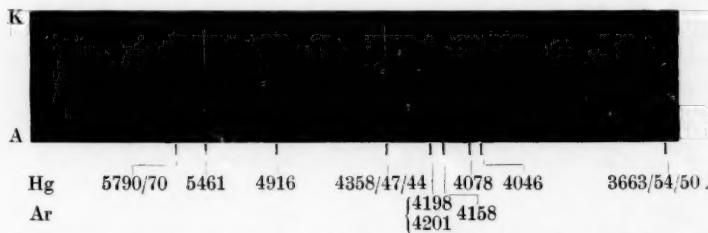


Abb. 3. Die Spektralaufnahme lässt deutlich die Abnahme der Quecksilberintensität und die Zunahme der Argointensität längs des Rohres in Richtung Kathode—Anode erkennen. Die Aufnahmen entsprechen Abständen von je 6 cm. Auswertung der Platten am Schnellphotometer

dampfdruckes im Entladungsgefäß. Die Sonden I bis V waren unbewegliche Zylindersonden, deren von der Glasisolierung freie Teile sich in der Achse des Entladungsrohres befanden.

Die Intensitätsmessungen wurden entweder mittels eines Spektrographen oder direkt mit Interferenzfilter und Photozelle durchgeführt. Aus der posi-

tiven Säule wurde ein kurzes Stück ausgeblendet und auf den Spalt des Spektrographen bzw. der Photozelle abgebildet. Spektrograph bzw. Photozelle konnten in fester Justierung parallel zum Rohr verschoben werden. Längs der positiven Säule wurden von einem eingestellten Entladungszustand jeweils 14 Aufnahmen im Abstand von je 6 cm gemacht.

Die Elektronentemperaturen wurden einerseits nach der Methode der Sondencharakteristiken bestimmt. Andererseits wurde versucht, unter der Voraussetzung konstanter Argonkonzentration zusätzlich Elektronentemperaturwerte aus Argonintensitätsmessungen zu gewinnen. Dazu muß allerdings nach (3.3) die Elektronentemperatur wenigstens an einer Stelle des Rohres bekannt sein, d. h., mindestens eine Sondenmessung ist unvermeidlich.

Im Laufe der vorbereitenden Messungen zeigte es sich, daß die Füllung des Rohres mit Quecksilber beträchtliche Zeit in Anspruch nahm. Brannte im Rohr bei zunächst ausgefrorenem Quecksilbervorrat eine reine Argonentladung und wurde zu einer bestimmten Zeit das Kühlgefäß durch das Wärmebad ersetzt, so konnte bei fortgesetzter Zunahme des Quecksilbergehaltes im Rohr erst nach 4 bis 5 Stunden die erwartete Stationarität nachgewiesen werden. Dabei wurden zum Nachweis des stationären Zustandes die Spannung, die Grenzstromstärke für den Einsatz von Plasmashwingungen und der Gang der Intensität einer Quecksilberlinie in Abhängigkeit von der Zeit gemessen. Die Vorgänge, die zu der genannten unerwartet großen Zeitdifferenz führen, wurden nicht näher untersucht. Eine eingehende Untersuchung des nichtstationären Zustandes erscheint jedoch lohnend, und zwar auch für den Fall, wo nur der Entmischungsvorgang selbst beobachtet wird, d. h., wo der gewünschte Quecksilbergehalt im Rohr schon vorhanden ist. Von einem solchen Zustand ausgehend sind die Entladungsparameter bereits nach einigen Minuten stationär.

Für die Temperatur des Quecksilbervorrates wurden nur die Werte  $T_q = 30$  und  $50^\circ\text{C}$  mit den dazugehörigen Satt dampfdrucken  $p_q = 2,79 \cdot 10^{-3}$  und  $1,28 \cdot 10^{-2}$  mm Hg gewählt. Bei Temperaturen des Quecksilbervorrates oberhalb  $50^\circ$  wird die Entladung vollständig vom Quecksilber getragen. Es findet keine Entmischung mehr statt. Die Untersuchung des Effektes bei Temperaturen unterhalb von  $30^\circ$  erfordert einen größeren technischen Aufwand und führt qualitativ zu keinerlei neuen Ergebnissen. Eine Unterteilung des Temperaturbereiches zwischen 30 und  $50^\circ$  ist nicht möglich, da sich die Elektronentemperaturen bei Änderung von  $T_q = 30$  auf  $T_q = 40^\circ$  etwa um 10% ändern und damit noch in dem bei Sondenmessungen auftretenden Fehlerbereich liegen.

### 7. Zusammenstellung der in den Rechnungen benutzten Konstanten

Der Quecksilberpartialdruck an der Stelle  $x = x_s$  (Mündung des Zuleitungsrohres in das Entladungsrohr), entspricht dem Satt dampfdruck des Quecksilbervorrates bei dessen Temperatur. Da die Temperatur im Rohr an der Stelle  $x_s$  von der Temperatur des Quecksilbervorrates verschieden ist, ist die Konzentration bei gegebenem Satt dampfdruck aus  $p = n^{(2)} kT$  zu berechnen, wobei für  $T$  die Umgebungstemperatur des Rohres einzusetzen ist ( $75^\circ\text{C}$ ). Daraus ergeben sich bei den gewählten Temperaturen  $T_q$  des

Quecksilbervorrates am Fixpunkt  $x_s$  die Konzentrationen

$$T_0 = 30^\circ \text{ C} : n^{(2)}(x_s) = 7,85 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$$

$$T_0 = 50^\circ \text{ C} : n^{(2)}(x_s) = 3,6 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}.$$

Die Argonkonzentration entspricht dem Fülldruck  $p = 1 \text{ mm Hg}$ . Sie wurde nicht variiert. Die Füllung erfolgte bei Zimmertemperatur:

$$n^{(1)} = 3,3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}.$$

Für den konstanten Faktor des Stoßintegrals (siehe 1.4) ergaben Messungen an reinem Argon

$$A_{0\infty}^{(1)} f_{0\infty}^{(1)} = 1,286 \cdot 10^{-8}.$$

Der entsprechende Wert für Quecksilber wurde nach Zahlenangaben aus der Arbeit von Ludwig berechnet. Danach wird die Stoßquerschnittsfunktion  $Q_{0\infty}(U_e)$  durch Überlagerung zweier Ausdrücke für  $Q_{0\infty}(U_e)$  mit passenden  $Q_{m0\infty}$  und  $U_{m\infty} = U_{m0\infty}$  approximiert. Für den Faktor des Stoßintegrals ergibt sich daraus

$$A_{0\infty}^{(2)} f_{0\infty}^{(2)} = 6,95 \cdot 10^{-8}.$$

Bei Argon führten ähnliche Berechnungen mit Zahlenwerten aus Granowski<sup>8)</sup> zu geringfügigen Diskrepanzen mit den Messungen. Daher wurde der oben genannte experimentelle Wert benutzt.

Die in der Literatur vorhandenen Angaben über die Beweglichkeiten von Argon- und Quecksilberionen in ihren eigenen Gasen sind im vorliegenden Falle nicht ohne weiteres verwertbar. Dies gilt insbesondere für die Quecksilberionen, deren Beweglichkeit wegen des großen Konzentrationsunterschiedes hauptsächlich durch Stöße mit den Argon-Atomen bestimmt wird. Daher wurde die Beweglichkeit der Quecksilberionen aus den Messungen selbst errechnet, obwohl dies den konsequenten Vergleich der dargestellten Theorie mit den Intensitäts- und Elektronentemperaturmessungen stört. Zur Ermittlung aus Messungen genügt die Kenntnis der Elektronentemperatur und der Konzentrationen  $n^{(1)}$  und  $n^{(2)}$  an der Stelle  $x_s$  des Rohres. Aus (2.2) ergab sich

$$b_p^{(2)} = 1,082 \cdot 10^3 \frac{\text{cm}^2}{\text{Volt sec}}.$$

Für den entsprechenden Wert der Argoniumen dürften die Angaben aus der Literatur, die sich auf die Beweglichkeit der Argoniumen in Argon selbst beziehen, hinreichend sein, da die Argonkonzentration um mindestens drei Größenordnungen höher liegt, als die Quecksilberkonzentration. Holstein<sup>9)</sup> gibt Beweglichkeiten für Atom- und Molekülionen an. Aus zwei neueren Arbeiten von Boyd und Morris<sup>10)</sup> und Boyd<sup>11)</sup> geht hervor, daß in dem hier zugrunde liegenden Strom- und Feldstärkebereich nur die Beweglichkeit der Atomionen in Frage kommt:

$$b_p^{(1)} = 1,22 \cdot 10^3 \frac{\text{cm}^2}{\text{Volt sec}}.$$

<sup>8)</sup> W. L. Granowski, Der elektrische Strom im Gas. Übersetzung: Berlin 1955.

<sup>9)</sup> T. Holstein, Physic. Rev. **82**, 567 (1951).

<sup>10)</sup> A. L. F. Boyd, D. Morris, Proc. physic. Soc. A **68**, 1 (1955).

<sup>11)</sup> A. L. F. Boyd, Proc. physic. Soc. A **68**, 11 (1955).

Da die Elektronenbeweglichkeit von  $U_e$  und  $n^{(2)}$  abhängt, darf sie eigentlich nicht als Konstante behandelt werden. Die Theorie des Elektronentemperatur- und Quecksilberkonzentrationsverlaufes wurde jedoch unter der Voraussetzung  $b_e = \text{const}$  entwickelt. Diese Voraussetzung trifft zu für kleine Konzentrationen der Zusatzkomponente  $n^{(2)}$  und für geringe Schwankungen der Elektronentemperatur. Da zunächst nicht sicher war, unterhalb welcher Konzentration der Einfluß des Quecksilbers auf die Elektronenbeweglichkeit zu vernachlässigen ist, wurden den Berechnungen des folgenden Abschnittes ( $T_g = 30^\circ$ ) versuchsweise zwei Werte zugrunde gelegt. Der eine dieser Werte ergibt an der Stelle  $x = x_s$  die gemessene Neigung der Elektronentemperaturkurven:

$$b_{e_1} = 2,5 \cdot 10^6 \frac{\text{cm}^2}{\text{Volt} \cdot \text{sec}}.$$

Er bezieht sich auf  $n^{(2)}(x_s) = 7,85 \cdot 10^{13}$  und  $U_e = 14000^\circ \text{K}$ . Der zweite Wert bezieht sich auf die gleiche Konzentration und auf  $U_e = 15000^\circ \text{K}$ :

$$b_{e_2} = 2,95 \cdot 10^6 \frac{\text{cm}^2}{\text{Volt} \cdot \text{sec}}.$$

Er liefert in einem mittleren Bereich des Rohres die richtige Neigung der Quecksilberintensitätskurve für  $i = 3 \text{ A}$ . Die Werte  $b_{e_1}$  und  $b_{e_2}$  reichen aus, um die Theorie durch Vergleich mit den Messungen prinzipiell zu bestätigen. Der Fall  $T_g = 50^\circ$  kann damit jedoch nicht mehr erfaßt werden. In dem entsprechenden Abschnitt wird daher nur qualitativ diskutiert. Dagegen eröffnet sich hier die Möglichkeit einer Ermittlung der Funktion  $b_e = b_e(n^{(2)}, U_e)$ . Die Ergebnisse dieser Betrachtungen bestätigen die Annahmen  $b_{e_1}$  und  $b_{e_2}$ .

Der Diffusionskoeffizient für die Diffusion der Hg-Atome in Ar ergibt sich nach einer Formel von Stefan-Maxwell [Eucken<sup>12)</sup>, S. 344] für den vorliegenden Fall zu

$$D = 75 \text{ cm}^2/\text{sec}.$$

### 8. Resultate bei $T_g = 30^\circ$

#### 8.1 Verlauf der Elektronentemperatur für verschiedene Stromstärken

Um in bezug auf die Messungen eine Diskussionsgrundlage zu haben, sollen an dieser Stelle zunächst die sich aus (2.7) ergebenden Abhängigkeiten  $U_e(x)$  für  $i = 2, 3, 4$  und  $5 \text{ A}$  erörtert werden. Die Elektronentemperatur am Fixpunkt  $x_s$  ist zur Bestimmung der Beweglichkeit der Quecksilberionen bereits experimentell zu  $U_e(x_s) = 14000^\circ \text{K}$  ermittelt worden. Dieser Wert ist infolge der konstanten Quecksilberkonzentration an dieser Stelle unabhängig vom Entladungsstrom. Alle aus (2.7) zu ermittelnden Kurven müssen daher den Punkt  $(14000^\circ, x_s)$  durchlaufen. Man gewinnt sie, indem man für einige  $U_e$ -Werte mit Hilfe der besprochenen Konstanten den jeweiligen Anstieg von  $U_e$  berechnet. Das Resultat ist in Abb. 4 wiedergegeben.

Nach (2.7) ist der Anstieg dem Strom proportional. Steilere Kurven entsprechen also höheren Stromstärken. Es zeigt sich, daß alle Kurven auf

<sup>12)</sup> A. Eucken, Lehrbuch der chem. Physik II, 1 (1950).

entlich  
ntem-  
er der  
kleine  
ungen  
elcher  
chkeit  
nittes  
dieser  
ronen-  
  
zweite  
0° K:  
  
g der  
ischen  
u be-  
erden.  
ntiert.  
ktion  
e An-  
  
ergibt  
r den  
  
rom-  
  
aben,  
seiten  
ratur  
ionen  
Wert  
unab-  
süßen  
n für  
An-  
  
rven  
n auf

der Anodenseite in die Gerade  $U_e = \text{const} = 15000^\circ \text{K}$  (Elektronentemperatur für reines Argon bei  $p = 1 \text{ mm Hg}$ , unabhängig von der Stromstärke) einmünden, und zwar um so eher, je größer der Entladungsstrom ist. Da laut Trägerbilanz der niedrigeren Elektronentemperatur die höhere Quecksilberkonzentration entspricht, wird, wie aus Abb. 4 hervorgeht, von der Theorie für höheren Strom die stärkere Entmischung verlangt. Man erwartet also experimentell an einem Punkt links vom Fixpunkt  $x_s$  (Kathodenseite) mit steigendem Strom fallende Elektronentemperatur bei steigender Konzentration  $n^{(2)}$ , rechts von  $x_s$  dagegen steigende Elektronentemperatur bei fallender Konzentration der Zusatzkomponente.

Da an einer beliebigen Stelle des Rohres die theoretischen Elektronentemperaturwerte für alle Entladungsströme innerhalb eines 10proz. Bereiches liegen, läßt sich bezüglich der Stromabhängigkeit der Elektronentemperatur an einer Stelle des Rohres die Theorie nicht durch Sondenmessungen bestätigen, da hierbei alle Meßwerte innerhalb der Fehlergrenzen liegen, die für Sondenmessungen veranschlagt werden müssen. Die Verhältnisse gestalten sich erst bei höherem Quecksilbergehalt günstiger, wie die Messungen bei  $T_q = 50^\circ$  zeigen.

Abb. 5 belegt die grund-sätzliche Übereinstimmung der Abhängigkeit der Elektronentemperatur vom Abstand von der Kathode mit dem entsprechenden theoretischen Verlauf jedoch auch für  $T_q = 30^\circ$ . Grobe Abweichungen zeigen sich an Sonde V. Hier steigen die Elektronentemperaturwerte beträchtlich

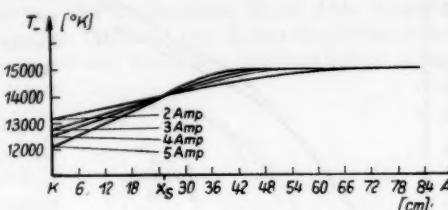


Abb. 4. Theoretischer Verlauf der Elektronentemperatur. A: Anode, K: Kathode,  $x_s$ : Mündungsstelle der Quecksilberzuführung in das Entladungsrohr

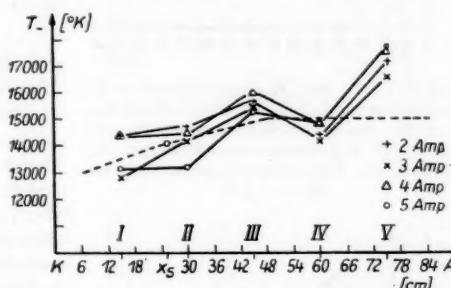


Abb. 5. Verlauf der Elektronentemperatur nach Sondenmessungen. Theoretischer Verlauf für  $i = 3 \text{ A}$  gestrichelt

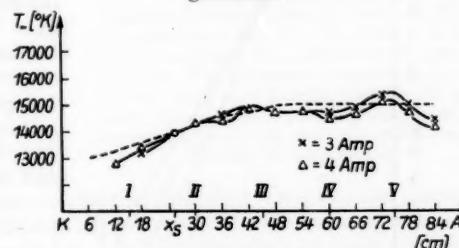


Abb. 6. Elektronentemperatur nach Argonintensitätsmessungen, berechnet nach (3.3) unter der Voraussetzung, daß die Elektronentemperatur an der Stelle  $x = x_s$  bekannt ist. Theoretischer Verlauf für  $i = 3 \text{ A}$  gestrichelt

über den Wert hinaus an, der aus der Trägerbilanz für reines Argon gefordert wird. Die Ursache für diese offenbar systematischen Abweichungen konnten nicht geklärt werden. Der Versuch einer mathematischen Erfassung der

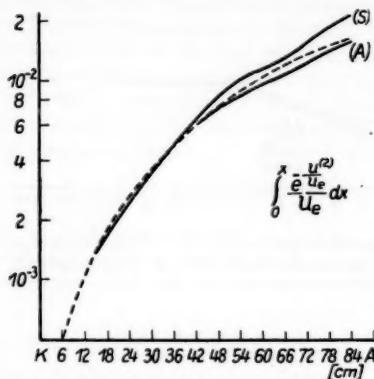


Abb. 7. Die den Konzentrationsberechnungen zugrunde liegende Integralfunktion  $\lambda(x)$  für die durch Sondenmessungen (S) und durch Argonintensitätsmessungen (A) gewonnenen Elektronentemperaturkurven für  $i = 3$  A

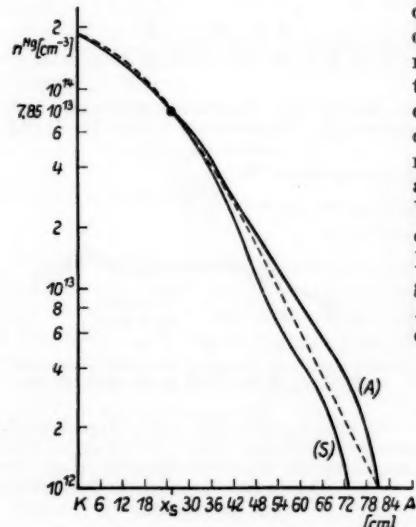


Abb. 8. Quecksilberkonzentrationsverlauf nach den Elektronentemperaturmessungen (S) und (A) für  $i = 3$  A. Entsprechender theoretischer Verlauf gestrichelt

Ortsabhängigkeit von Stufenprozessen, Ionen- und Elektronenbeweglichkeiten erforderte einen hohen Aufwand, der nur zu geringen Korrekturen führte.

Abgesehen von den Abweichungen an Sonde V sind die aus der Rückrechnung aus Argon-Intensitätsmessungen gewonnenen Ergebnisse noch befriedigender (Abb. 6). Eine Abhängigkeit vom Strom ist wegen der Geringfügigkeit des Effektes allerdings auch hier nicht erkennbar.

## 8.2 Hg-Konzentration und Intensität der Hg-Linien für $i = 3$ A

Der Verlauf der Quecksilberkonzentration wird grundsätzlich durch (1.12) wiedergegeben. Zur Auswertung dieser Formel muß zunächst der Verlauf der Integralfunktion  $\lambda(x)$  diskutiert werden. Neben dem theoretischen Verlauf der Elektronentemperaturkurve für  $i = 2$  A sind dabei wegen der Abweichungen auch die gemessenen Elektronentemperaturkurven zu berücksichtigen. Der aus Sondenmessungen gewonnene Verlauf von  $U_e(x)$  wurde hierzu mehr oder weniger willkürlich geglättet. Die Integration wurde graphisch durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 7 wiedergegeben. Es zeigt sich, daß die Schwankungen der anoden-seitig gemessenen Elektronentemperaturen durch die Integration weitgehend ausgeglichen werden. Ein nichtmonotoner Verlauf von  $U_e(x)$  geht in einen monotonen Verlauf der  $\lambda$ -Funktion über. Wie im folgenden Abschnitt noch gezeigt wird, bedeutet dies, daß der prinzipielle Verlauf der Konzentration gegenüber solchen Elektronentempera-

efordert  
konnten  
ung der  
prozess-  
mbeweg-  
hohen  
Korrekt-

schungen  
er Rück-  
ätzmes-  
se noch  
Abhän-  
der Ge-  
lerdings

nd In-  
r  $i = 3 A$

eksilber-  
sätzlich  
Zur Aus-  
unächst  
on  $\lambda(x)$   
m theo-  
ektronen-  
 $A$  sind  
en auch  
ntemper-  
en. Der  
vonnene  
zu mehr  
tettet. Die  
durch-  
sind in  
igt sich,  
anoden-  
ektronen-  
e Inten-  
eglichen  
ner Ver-  
n einen  
 $\lambda$ -Funk-  
den Ab-  
ird, be-  
nzipieelle  
n gegen-  
ntempe-

ratschwankungen unempfindlich ist. Der Intensitätsverlauf reagiert dar- auf stärker.

Mit Hilfe der  $\lambda$ -Funktionen läßt sich nun ohne weiteres  $n^{(2)}(x)$  nach (1.12) bestimmen, wenn man beachtet, daß die Quecksilberkonzentration an der Stelle  $x_s$  bekannt ist. Das Ergebnis der Rechnungen ist in Abb. 8 wieder- gegeben. Infolge der ausgleichenden Wirkung der Integralfunktion unter- scheiden sich die Konzentrationsverläufe trotz der beträchtlichen Abwei- chungen der Elektronentemperatur- kurven nicht sehr stark voneinander. Ob die durchschnittliche Steilheit des Konzentrationsverlaufes der Wirklich- keit entspricht, kann nur der Ver- gleich mit den daraus ermittelten Intensitätsabhängigkeiten zeigen.

Die mit der  $\lambda$ -Funktion errech- neten Intensitätskurven sind zu- sammen mit dem für  $i = 3 A$  ge- messenen Intensitätsverlauf in Abb. 9 aufgetragen. Es zeigt sich, daß die mit Hilfe des Elektronentemperatur- verlaufes  $A$  ermittelte Intensitäts- kurve gut mit der gemessenen über- einstimmt. Bis zur Stelle  $x = 78$  findet man sogar in Feinheiten Über- einstimmung. Man beachte z. B. die Ausdehnungen an den Stellen  $x = 36$  und  $72$ . Sie spiegeln das Verhalten der Elektronentemperatur nach  $A$  an diesen Stellen deutlich wider. Dar- aus geht hervor, daß der nach Argon- intensitätsmessungen ermittelte Ver- lauf der Elektronentemperatur der Wirklichkeit besser entspricht, als die groben Elektronentemperatur- bestimmungen durch Sondenmes- sungen.

Die Übereinstimmung des rein theoretisch bestimmten Intensitäts- verlaufes mit dem gemessenen ist ebenfalls bedeckend. Damit sind prinzipiell die Formeln (1.12) und (2.7) bestätigt. Ferner ist der Zusammenhang zwischen Konzentration und Intensität richtig (3.2). Insbesondere ist dann auch der nach  $A$ , Abb. 7, mit Hilfe von (1.12) ermittelte Konzentrationsverlauf  $A$ , Abb. 8, als der Wirklichkeit entsprechend anzusehen.

Die Abweichungen von den rein theoretischen Kurven in Kathoden- und Anodennähe des Rohres sind auf Unsicherheiten im experimentellen Elek- tronentemperaturverlauf in diesen Bereichen zurückzuführen. Ferner ist zu bedenken, daß die Elektronenbeweglichkeit als Konstante behandelt wurde. In Kathodennähe z. B. wird  $b_e$  wegen der dort herrschenden größeren Queck- silberkonzentration kleiner sein, wodurch ein etwas steilerer Anfangsabfall

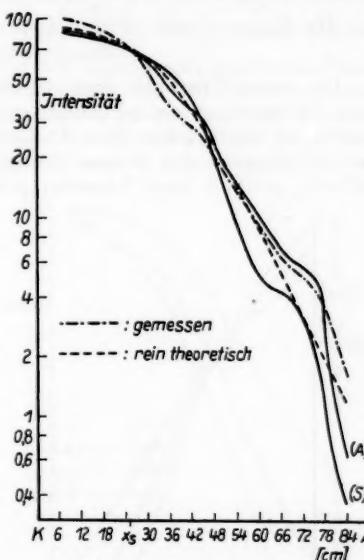


Abb. 9. Quecksilberintensität nach den Elektronentemperaturen (S) und (A). Zum Vergleich sind der rein theoretische sowie die gemessene Intensitätsverlauf eingezeichnet. Die gemessene Intensität wurde an der Stelle  $x = 6$  willkürlich = 100 gesetzt. Die berechneten Intensitäten wurden an der Stelle  $x = x_s$ , der dort gemessenen Intensität angeglichen

der Konzentration und damit der Intensität bewirkt wird. In Anodennähe ist die Quecksilberkonzentration so klein, daß die Beweglichkeit nur noch von der Elektronentemperatur abhängt. Da diese in dem genannten Rohrabschnitt offenbar schwankt (nach den *A*-Kurven um wenigstens 1000°), wären auch in der Konzentrations- und Intensitätsberechnung Korrekturen erforderlich.

### 8.3 Hg-Konzentration und Intensität der Hg-Linien bei verschiedenen Stromstärken

Um einen Überblick über die Abhängigkeit der Konzentrationskurven vom Strom zu gewinnen genügt es, sich auf einen Elektronentemperaturverlauf zu beschränken. Eine Abschätzung des Fehlers, der durch die Nichtberücksichtigung der Stromabhängigkeit der Elektronentemperaturkurven auftritt, gewinnt man folgendermaßen: Nach der theoretisch ermittelten

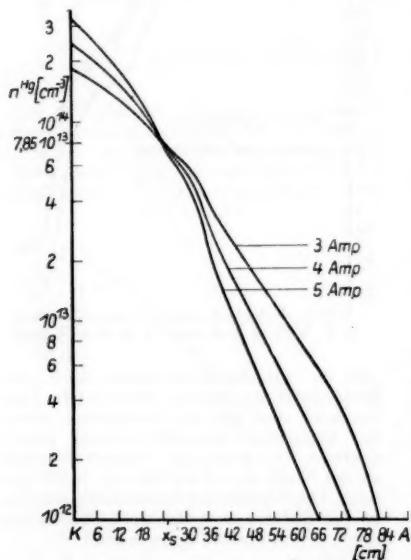


Abb. 10. Konzentrationsverlauf in Abhängigkeit von der Stromstärke. An der Stelle  $x = 84$  beträgt bei 5 A die Konzentration etwa  $10^{11}$ . Der Konzentrationsunterschied zwischen Kathoden- und Anodenhähe beträgt damit mehr als 3 Größenordnungen

geringen Änderung von  $U_e(x)$  mit dem Strom auch hier vernachlässigbar klein. Vergleichende Rechnungen haben gezeigt, daß der Strom im Exponenten von (1.12) im Falle einer geringen Gesamtänderung der Elektronen-temperatur über die Rohrlänge stets den stärksten Einfluß besitzt. Damit befreit man sich von der Tatsache, daß die Unterschiede des Elek-

tronentemperaturverlaufs bei verschiedenen Strömen nicht eindeutig erkennbar waren. In Abb. 10 sind nach (1.12) mit Hilfe des für  $i = 3$  A gemessenen Elektronentemperaturverlaufes berechneten Konzentrationsabhängigkeiten für  $i = 3, 4$  und  $5$  A dargestellt. Nach der angeführten Fehlerabschätzung dürften sie der Wirklichkeit gut entsprechen. Sie sind den im folgenden angeführten Intensitätsberechnungen zugrunde gelegt.

Die Intensitäten für  $3, 4$  und  $5$  A ergeben sich aus Abb. 10 im wesentlichen durch Multiplikation mit dem Faktor  $\exp\left\{-\frac{U_{0s}}{U_e}\right\}$ . Wegen dieses Faktors reagiert die Intensität wesentlich stärker auf Elektronentemperaturschwankungen, als die Konzentration. Unterscheiden sich die Elektronentemperaturkurven für die einzelnen Stromstärken so, wie dies aus Abb. 4 hervorgeht, oder stärker, so muß der entsprechende Einfluß auf die Intensitätsabhängigkeiten bemerkbar sein. Die Abbnn. 11 und 12 zeigen einmal die ge-

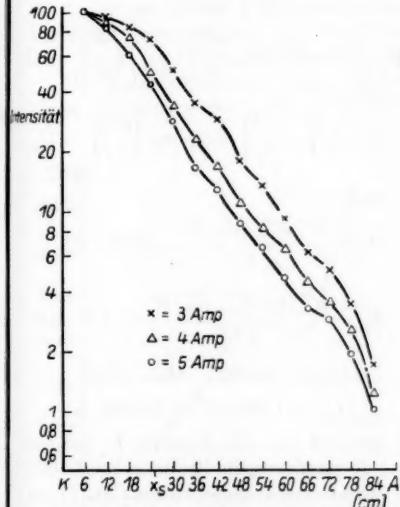


Abb. 11. Spektrographisch ermittelter Intensitätsverlauf der Quecksilberlinie  $5461\text{ Å}$  für  $3, 4$  und  $5$  A. Die Intensität an der Stelle  $x = 6$  ist für jede Stromstärke willkürlich = 100 gesetzt

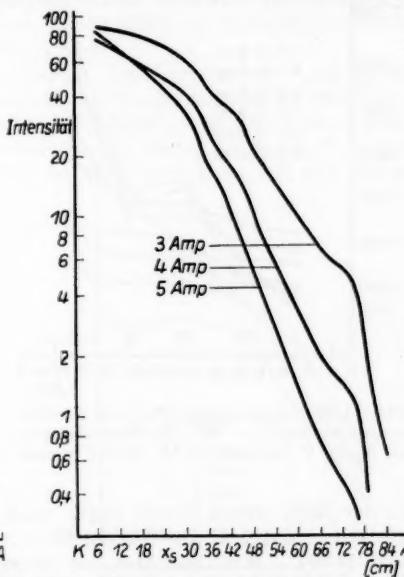


Abb. 12. Intensitätsverlauf für  $i = 3, 4$  und  $5$  A, berechnet nach (3.2) mit  $n^{(2)}$  nach Abb. 10 und  $U_e$  nach (4). Die freie Konstante ist jeweils so gewählt, daß die berechnete Intensität im Fixpunkt  $x_s$  mit der dort gemessenen Intensität übereinstimmt. (Vgl. Abb. 11)

messenen Intensitätskurven und zum anderen die Intensitätskurven, die sich aus den Konzentrationsabhängigkeiten nach Abb. 10 unter der Annahme eines einzigen Elektronentemperaturverlaufes ergeben. Die Übereinstimmung ist gut. Es zeigt sich jedoch, daß die berechneten Kurven stärker gespreizt sind, als die gemessenen. Tatsächlich muß der einem höheren Strom zu-

kommende steilere Verlauf der Elektronentemperaturkurve einen flacheren Verlauf der Intensität bewirken, wodurch die Parallelität der gemessenen 4- und 5-A-Kurven bezüglich der 3-A-Kurve hervorgerufen wird. Da die Stromabhängigkeit der Elektronentemperaturkurven nicht eindeutig bestimmt werden konnte, muß auf eine eingehendere quantitative Diskussion verzichtet werden.

### 9. Resultate bei $T_e = 50^\circ$

#### 9.1 Elektronentemperaturen

Die aus Sondenmessungen gewonnenen Elektronentemperaturen sind in Abb. 13 wiedergegeben. Es fällt zunächst auf, daß  $U_e(x_s)$  vom Strom abhängt. Dies läßt sich durch das Auftreten von Stufenprozessen bei der Ionisation des Quecksilbers erklären. Der dafür maßgebliche Faktor  $\gamma$  läßt sich

wie folgt ermitteln: Zunächst kann  $U_e(x_s)$  für  $\gamma = 1$  nach

$$n^{(1)} \frac{s_0^{(1)} \infty}{U_e} \cdot \frac{1}{b_p^{(1)}} \cdot \left( \frac{R}{\mu_1} \right)^2 + n^{(2)}(x_s) \frac{s_0^{(2)} \infty}{U_e} \cdot \frac{1}{b_p^{(2)}} \cdot \left( \frac{R}{\mu_1} \right)^2 = 1$$

oder

$$k_1 \exp \left\{ -\frac{U^{(1)}}{U_e} \right\} + k_2 \exp \left\{ \frac{U^{(2)}}{U_e} \right\} = U_e \quad (10.11)$$

mit

$$k_1 = \frac{n^{(1)} A_{0\infty}^{(1)} f_{0\infty}^{(1)} R^2}{\mu_1^2 b_p^{(1)}} = 2,42 \cdot 10^5,$$

$$k_2 = \frac{n^{(2)}(x_s) A_{0\infty}^{(2)} f_{0\infty}^{(2)} R^2}{\mu_1^2 b_p^{(2)}} = 1,6 \cdot 10^4$$

bestimmt werden. Man erhält

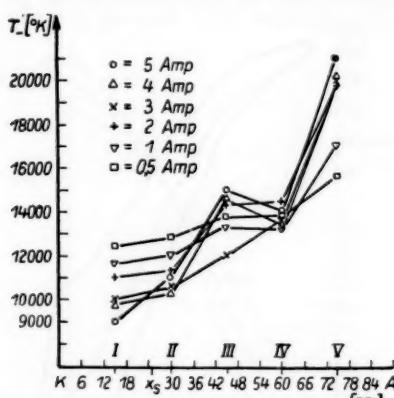
$$U_e = 1,065 \text{ eV} = 12350^\circ \text{K}.$$

Abb. 13. Elektronentemperatur nach Sondenmessungen für  $T_e = 50^\circ$ . Die Abweichungen an Sonde V konnten nicht erklärt werden

In der Nähe dieses Wertes liegen nach Abb. 13 nur die Kurven  $U_e(x)$  für  $i = 0,5 \text{ A}$  und  $1 \text{ A}$ . Die Kurven für  $i > 1 \text{ A}$  passieren die Stelle  $x_s$  bei  $10000$  und  $11000^\circ$ . Man hat also für diese Elektronentemperaturen (10.11) zu lösen, wobei sich neue  $k_2$ -Werte ergeben, die dann in die Faktoren  $k_2 \cdot \gamma$  aufgespalten werden können. Man erhält

$U_e (\text{eV})$	$U_e(x_s) (\text{eV})$	$k_2$	$\gamma$	
10000	0,861	$1,485 \cdot 10^5$	9,28	
10500	0,905	$8,36 \cdot 10^4$	5,22	
11000	0,948	$5,33 \cdot 10^4$	3,33	
12000	1,033	$2,11 \cdot 10^4$	2,32	
12350	1,065	$1,6 \cdot 10^4$	1	

Die Annahme solcher Stufenprozesse für Argon ist unwahrscheinlich, da Argonatome eine Anregungsenergie für metastabile Niveaus besitzen, die



höher liegt, als die Ionisationsenergie des Quecksilbers. Ferner ist  $U_{0\infty}^{(1)} - U_{0\infty}^{(1)}$  ( $\nu$  metastabil), klein gegen  $U_{0\infty}^{(1)}$ , so daß durch Stufenionisation keine wesentlich günstigeren Verhältnisse entstehen würden. Dies läßt sich zeigen, indem man die Argonionisationsenergie gleich der Anregungsenergie metastabiler Stufen des Argons setzt ( $\approx 12$  V). Nimmt man noch gleichen Stoßquerschnitt an (ungünstigste Annahme), so wird (10.11) gelöst durch

$$U_e = 11000^\circ.$$

Die für  $i = 3, 4$  und  $5$  A gemessenen Elektronentemperaturen liegen aber noch darunter.

Ebensowenig können Stöße zwischen Argonatomen im metastabilen Zustand und Quecksilberatomen zu einer Herabsetzung der Elektronentemperatur führen, da dies eine hohe, mit der Elektronenkonzentration vergleichbare Konzentration metastabiler Argonatome erfordert. Zur Erklärung der gemessenen Elektronentemperaturen bleibt daher nur noch die Annahme von Stufenionisationen der Quecksilberatome.

Außer an Sonde V entspricht im übrigen die Kurvenschar  $U_e(x)$  qualitativ den Erwartungen. Auf Grund des höheren Quecksilbergehaltes im Gegensatz zu  $T_e = 30^\circ$  ist hier deutlich eine Abhängigkeit vom Strom erkennbar.

Die außerordentlich hohen Elektronentemperaturen an Sonde V haben keine Erklärung gefunden. Sie stehen im Widerspruch zu den aus Argon

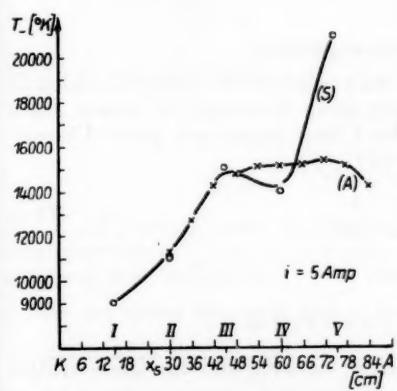


Abb. 14. Elektronentemperaturverlauf für  $i = 5$  A aus Sondenmessungen (S) und Argointensitätstmessungen (A)

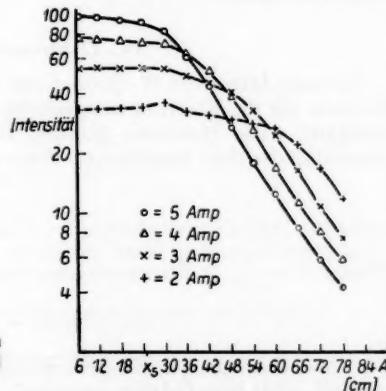


Abb. 15. Intensitätsverlauf der Linie 5461 Å für einige Stromstärken. An der Stelle  $x = 6$  ist die Intensität für  $i = 5$  A willkürlich gleich 100 gesetzt. Die eingezzeichneten Intensitätswerte für  $i = 4, 3$  und  $2$  A stehen im richtigen Verhältnis zu denen bei  $5$  A

intensitätsmessungen gewonnenen Werten. Dazu Abb. 14. Eine quantitative Diskussion an Hand von (2.7) ist wegen der erwähnten Stufenprozesse sowie wegen der zunehmenden Abhängigkeit der Elektronenbeweglichkeit von der Quecksilberkonzentration in diesem Rahmen nicht möglich.

### 9.2 Intensität der Hg-Linien

Die Intensitätskurven der Abb. 15 sind mit Hilfe einer Photozelle aufgenommen. Die wiedergegebenen Intensitätswerte für verschiedene Ströme an gleichen Stellen des Rohres stehen daher im richtigen Verhältnis zueinander.

Die Messungen entsprechen qualitativ den theoretischen Erwartungen. Mit wachsendem Strom nimmt der Entmischungsgrad zu. Gleichzeitig nimmt  $U'_e$  im Durchschnitt zu, so daß die Intensitätskurven in Anodennähe parallel verlaufen. Bei Strömen kleiner als 2 A konnte keine Intensitätsänderung mehr beobachtet werden. Daraus darf aber nicht geschlossen werden, daß auch  $\frac{\partial n^{(2)}}{\partial x} = 0$  ist. Auch für  $i = 0,5$  A geht aus Abb. 13 noch eindeutig  $U'_e \neq 0$  hervor. Damit ist dann auch die Konzentrationsänderung des Quecksilbers von Null verschieden.

Man erhält den ungefähren Verlauf der Konzentration für  $T_g = 50^\circ$  durch Verschiebung der entsprechenden Kurven für  $30^\circ$  (Abb. 10) derart, daß diese an der Stelle  $x = x_s$  der Wert  $n^{(2)}(x_s) = 3,6 \cdot 10^{14}$  durchlaufen. Bei den gemessenen Intensitätskurven der Abb. 11 und 15 ist ebenfalls nur eine geeignete Verschiebung erforderlich, um entsprechende Kurven zur Deckung zu bringen. Die Neigungen der abfallenden Teile der Intensitätskurven stimmen miteinander überein. Die Verschiebung stellt einfach eine lineare Transformation der Abszissenachse dar, ein Ergebnis, das den Erwartungen entspricht.

### IV. Elektronenbeweglichkeit

In einer Arbeit von Wojaczek und Rademacher<sup>13)</sup> werden verschiedene Formeln für die Elektronenbeweglichkeit durch Messungen an reinem Argon überprüft. Die Meßwerte genügen für 1 Torr Argon mit guter Übereinstimmung der dort angeführten Formel (8):

$$b_e = 2 \frac{e}{m} \frac{1}{(v/\lambda)} \quad (IV.1)$$

Wegen  $\lambda \sim \frac{1}{n \sigma}$ ,  $\sigma$  Transportquerschnitt, ist

$$1/b_e \sim \frac{1}{(v/\lambda)} \sim \int n \sigma v F(v) dv.$$

Für zwei Gase mit den Konzentrationen  $n^{(1)}$  und  $n^{(2)}$  und den Querschnitten  $\sigma^{(1)}$  und  $\sigma^{(2)}$  läßt sich daher schreiben

$$1/b_e \sim \int [n^{(1)} \sigma^{(1)} + n^{(2)} \sigma^{(2)}] v F(v) dv,$$

wobei

$$1/\lambda^{(1),(2)} = n^{(1)} \sigma^{(1)} + n^{(2)} \sigma^{(2)}$$

gesetzt wurde. Daraus folgt unmittelbar

$$1/b_e = 1/b_e^{(1)} + 1/b_e^{(2)} \quad (IV.2)$$

<sup>13)</sup> K. Wojaczek u. K. Rademacher, Ann. Physik 18, 237 (1956).

d. h.,  $b_e$  kann in Einzelbeweglichkeiten zerlegt werden derart, daß sich die reziproken Beweglichkeiten bezüglich der einzelnen Gase addieren. Nun kann man die Funktion  $1/b_e^{(1)}(U_e, n^{(i)})$  nach den Ergebnissen von Wojaczek und Rademacher durch eine passende Funktion approximieren und die gefundene Abhängigkeit verallgemeinern. Eine hinreichend anpassungsfähige Funktion ist

$$1/b_e^{(i)} = \frac{n^{(i)}}{\beta \cdot U_e^{-\alpha}}. \quad (\text{IV.3})$$

Nimmt man den Verlauf von  $b_e^{(1)}$  als bekannt an, so wird damit

$$1/b_e = \frac{1}{b_e^{(1)}} + \frac{n^{(2)}}{\beta \cdot U_e^{-\alpha}} \quad (\text{IV.4})$$

und zur Bestimmung von  $\alpha$  und  $\beta$  sind nur noch zwei Gleichungen mit zwei Meßwerten für  $b_e$  im Gasgemisch erforderlich. Diese können nun aus den vorliegenden Intensitäts- und Elektronentemperaturmessungen gewonnen werden.

Aus der Gl. (1.9) folgt

$$b_e = -\frac{\alpha \cdot i \cdot s_{0\infty}^{(2)} \cdot \gamma \cdot n^{(2)}}{\frac{\partial n^{(2)}}{\partial x} \cdot U_e} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{1}{D \cdot e_0 \cdot \pi \cdot \mu_1^2} = 4,6 \cdot 10^{15}.$$

Mit (3.3) und (3.4) erhält man

$$b_e = -\frac{\alpha \cdot i \cdot s_{0\infty}^{(2)} \cdot \gamma \cdot I_{r\mu}}{\left( I_{r\mu} - I_{r\mu} \frac{U_{0r}^{(2)}}{U_e^2} \cdot U_e \right) \cdot U_e}. \quad (\text{IV.5})$$

$I_{r\mu}$ ,  $I'_{r\mu}$ ,  $U_e$  und  $U'_e$  sind den Messungen zu entnehmen. Es darf natürlich nicht gleichzeitig  $I'_{r\mu} = 0$  sein. In diesem Falle verliert die Diffusionsgleichung ihre Gültigkeit.

Die gewählten Meßwerte sind in der folgenden Tabelle angeführt:

$x$	$U_e$	$U'_e$	$\gamma$	$I$	$I'$	$n^{(2)}(x)$	$b_e$
$x_s$	0,892	$1,35 \cdot 10^{-2}$	8	90	0,893	$3,6 \cdot 10^{14}$	$0,88 \cdot 10^6$
60	1,292	0	1	12,3	0,773	$1,47 \cdot 10^{13}$	$3,88 \cdot 10^6$

$U_e$  und  $U'_e$  sind den Messungen Abb. 14 entnommen. Die Übereinstimmung der Elektronentemperaturkurven aus Sondenmessungen und aus Argonintensitätsmessungen erhöht hier die Sicherheit für die vier angeführten Werte.  $I$  und  $I'$  entnimmt man der 5-A-Kurve der Abb. 15.  $n^{(2)}(x)$  für  $x = 60$  ist richtig, da in (3.3) die Anknüpfungskonstante  $\delta_{r\mu}$  nicht von der Elektronenbeweglichkeit abhängt.

Es ergibt sich

$$\alpha = -1, \beta = 4,05 \cdot 10^{20}.$$

Werden diese Werte in (IV.4) eingesetzt, so ist damit für einen gewissen beschränkten Anwendungsbereich ( $0 \leq n^{(2)} \leq 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10000^\circ \leq U_e \leq 16000^\circ \text{K}$ ,  $n^{(1)} = 3,3 \cdot 10^{16}$ ) die Elektronenbeweglichkeit im Gemisch Argon-Quecksilber als Funktion der Quecksilberkonzentration und der Elektronentemperatur darstellbar. Das Ergebnis ist in Abb. 16 wiedergegeben.

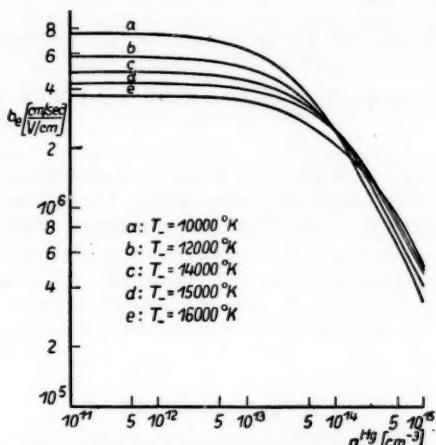


Abb. 16. Elektronenbeweglichkeit als Funktion der Quecksilberkonzentration bei verschiedenen Elektronentemperaturen. Die Angaben beziehen sich auf eine Neutralgastemperatur von  $70^\circ \text{C}$  und einen Argonfülldruck von 1 mm bei Zimmertemperatur

Es zeigt sich, daß eine Konzentration der Zusatzkomponente  $< 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  noch keine Änderung der Beweglichkeit bewirkt. Für  $n^{(2)} > 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  fällt  $b_e$  dann stark ab, und zwar um so steiler, je niedriger die Elektronentemperatur ist. Zwischen  $n^{(2)} = 6 \cdot 10^{13}$  und  $5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  hängt  $b_e$  nur schwach von  $U_e$  ab. Der Einfluß der Quecksilberkonzentration überwiegt hier den der Elektronentemperatur. Aus dem gleichen Grund kehrt sich die Abhängigkeit von  $U_e$  um, d. h., daß der höheren Elektronentemperatur auch die höhere Beweglichkeit im Gemisch entspricht.

An den Stellen  $7,85 \cdot 10^{13}$  und  $6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  liest man etwa die in Abschnitt 8 angeführten, im wesentlichen durch Probieren gefundenen Durchschnittswerte  $b_{e_1}$  und  $b_{e_2}$  ab, die den Berechnungen des Abschnittes 8 zugrunde gelegt sind. Desgleichen bestätigen einige weitere, mit Hilfe von (IV.5) gewonnene Beweglichkeitswerte im Rahmen der Meßgenauigkeit die Abhängigkeiten der Abb. 16. Eine endgültige Bestätigung muß jedoch weiteren Messungen, eventuell auf anderer Grundlage überlassen bleiben.

Ich danke Herrn Prof. Dr. R. Rompe, Direktor des Instituts für technische Physik der Akademie der Wissenschaften zu Berlin, für sein Interesse an der Arbeit. Für anregende und fördernde Diskussionen bin ich Herrn Dr. K. Rademacher und Herrn K. Wojaczek zu Dank verpflichtet.

Berlin, Physikalisch-Technisches Institut der Deutschen Akademie der Wissenschaften, Bereich Strahlungsquellen.

Bei der Redaktion eingegangen am 16. Dezember 1958.

# **Oberflächenleitfähigkeit unter Berücksichtigung der Streuung der Ladungsträger an der Oberfläche bei kleinen Bandverbiegungen**

*Von Hans Flietner*

Mit 15 Abbildungen

## **Inhaltsübersicht**

Für Halbleiter wird die Leitfähigkeit von Raumladungsrandsschichten parallel zur Oberfläche unter Berücksichtigung der Streuung der Ladungsträger an der Oberfläche berechnet. Die Berechnungen wurden für kleine Bandverbiegungen, wie sie im Feldeffekt auftreten, durchgeführt. Die hierbei notwendige Integration der Poisson-Gleichung lieferte ein Diagramm, aus dem sich in übersichtlicher Weise der Potentialverlauf in Raumladungsrandsschichten bei beliebiger Größe der Bandverbiegung und beliebiger Lage des Fermi-Niveaus im Halbleiterinneren ergibt. Numerische Auswertungen wurden für Germanium durchgeführt.

## **Einleitung**

An der Obfl.<sup>1)</sup> eines HL<sup>1)</sup> entsteht durch verschiedene Obfl.-Einflüsse eine dünne Schicht, in der die Bänder verbogen sind. In dieser Raumladungsrandsschicht ist die Leitfähigkeit für Stromfluß parallel zur Obfl. gegenüber der Leitfähigkeit im HL-Inneren verändert. Für verschiedene physikalische Probleme ist die Kenntnis der Leitwertänderung dieser Schicht in Abhängigkeit von der Größe der Bandverbiegung oder der auf der Obfl. induzierten Ladung notwendig. Die Leitwertänderung der Randschicht, die sich unter einem quadratischen Obfl.-Stück der Abmessung  $1 \times 1$  cm befindet, gegenüber dem Fall unverbogener Bänder für Stromfluß parallel zu einer Kante dieses Quadrates, nennt man Obfl.-Leitfähigkeit. Kann man in der Randschicht für die Ladungsträger die gleiche Beweglichkeit voraussetzen wie im Inneren, dann wird die Obfl.-Leitfähigkeit gegeben durch

$$\bar{\sigma}_s = e (\mu_n \delta N + \mu_p \delta P), \quad (1)$$

wobei  $\delta N$  und  $\delta P$  die zusätzlich zum Fall der neutralen Obfl. vorhandenen Elektronen bzw. Löcher sind.

Durch Streuung der Ladungsträger an der Obfl. kann aber die Leitfähigkeit einer dünnen Obfl.-Schicht verändert werden, nämlich dann, wenn die Anzahl der Stöße an der Obfl. vergleichbar wird mit der Anzahl der Stöße

<sup>1)</sup> Die Termini „Oberfläche“ und „Halbleiter“ und ihre Ableitungen sind im folgenden ihrer Häufigkeit wegen stets mit „Obfl.“ bzw. „HL“ abgekürzt.

untereinander. Ein solcher Fall tritt z. B. im Feldeffekt auf, wobei induzierte Ladung parallel zur Obfl. in einer solch dünnen Schicht fließt. In der Folge soll der Fall betrachtet werden, daß die Ladungsträger eine statistische Streuung an der Obfl. erfahren. Es ist dies der entgegengesetzte Grenzfall zur Reflexion, für den keine Beweglichkeitsänderung eintritt. Das tatsächliche Verhalten wird zwischen diesen beiden Möglichkeiten liegen. Man kann versuchen, dieser Tatsache dadurch Rechnung zu tragen, daß man einen Bruchteil als statistisch gestreut, den Rest als reflektiert annimmt<sup>2)</sup>). In der Folge soll jedoch nur die reine statistische Streuung betrachtet werden. Ein Energieaustausch beim Stoß kann hier, genau wie bei der Wechselwirkung mit dem Gitter, unberücksichtigt bleiben. Der Einfluß der Stöße soll durch eine effektive Beweglichkeit beschrieben werden, die durch

$$\sigma_s = e (\mu_{n \text{ eff}} \delta N + \mu_{p \text{ eff}} \delta P) \quad (2)$$

definiert wird. Effektive Beweglichkeiten in Randschichten unter der Annahme statistischer Streuung wurden zuerst von Schrieffer berechnet<sup>3)</sup>. Inzwischen konnte die Annahme der statistischen Streuung an der Obfl. auch experimentell gestützt werden<sup>3a)</sup>. Die von Schrieffer berechneten Werte gelten jedoch nur, falls die Gesamtbandverbiegung groß gegen  $kT$  ist. Im Feldeffekt-Experiment jedoch liegen die Bandverbiegungen zum großen Teil in Bereichen, die außerhalb der Gültigkeit der Schriefferschen Berechnungen liegen. Für dieses Gebiet der kleinen Bandverbiegungen sollen die effektiven Beweglichkeiten berechnet werden.

Für diese Berechnungen war eine Integration der Poisson-Gleichung notwendig, um den Gesamtverlauf des Potentials in der Randschicht bei beliebiger Größe der Bandverbiegung und beliebiger Lage des Fermi-Niveaus im HL-Innern in die Hand zu bekommen. Auch die Gesamtzahl der Ladungsträger und die Gesamtladung in der Raumladungsschicht wurde berechnet, um alle notwendigen Daten aus einheitlicher Quelle zu beziehen. Diese letztgenannten Daten stimmen mit denen aus Kingston und Neustadters Tabellen<sup>4)</sup> entnehmbaren Werten gut überein.

### 1. Bemerkungen zu den Volumendaten

Die zur Auswertung notwendigen theoretischen Berechnungen wurden bisher nur für Erschöpfungs-HL durchgeführt. Dies ist aber für Germanium keine große Einschränkung. Abb. 1

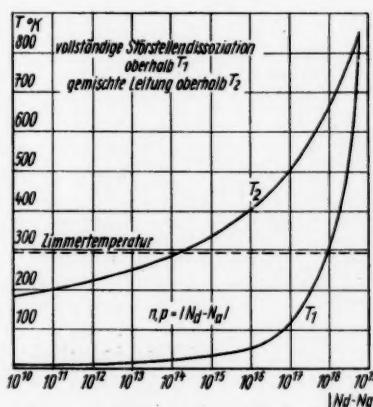


Abb. 1. Überblick über den Leitungscharakter von Germanium

<sup>2)</sup> A. H. Wilson, Theory of Metals, Cambridge 1953, S. 242ff.

<sup>3)</sup> J. R. Schrieffer, Physic. Rev. **97**, 641 (1955).

<sup>3a)</sup> J. N. Zemel u. R. L. Petritz, J. Phys. Chem. Solids **8**, 102 (1959); R. Missman u. P. Handler, J. Phys. Chem. Solids **8**, 109 (1959).

<sup>4)</sup> R. H. Kingston u. S. F. Neustadter, J. Appl. Phys. **26**, 718 (1955).

gibt einen Überblick darüber, welcher Spielraum in Dotierung und Temperatur durch diese Berechnungen erfaßt wird.

Unter Zugrundelegung der Neutralitätsbedingung im HL-Innenraum

$$\frac{1}{1 + e^{\frac{\zeta - E_d}{kT}}} N_d - \frac{1}{1 + e^{\frac{\zeta - E_a}{kT}}} N_a + n - p = 0 \quad (3)$$

wurde der Temperaturbereich zwischen  $T_1$  und  $T_2$  berechnet, in dem die Elektronen- bzw. Löcherkonzentration auf 5% genau gleich  $|N_d - N_a|$  ist. Oberhalb  $T_2$  ist dann gemischte Leitung.

Für  $T > T_1$  gilt für Elektronen und Löcher die Boltzmann-Verteilung, d. h.

$$n = n_i e^{\frac{\zeta - E_i}{kT}} \quad p = n_i e^{\frac{\zeta - E_i}{kT}}. \quad (4)$$

Für die Berechnungen wurde ein Bandabstand von 0,72 eV und eine Störstellenaktivierungsenergie von 0,01 eV zugrunde gelegt, die für Störstellen der III. und V. Gruppe des periodischen Systems zutrifft<sup>5)</sup>. Es ergibt sich für Germanium die Dichte der Ladungsträger im eigenleitenden Zustand bei Zimmertemperatur zu  $n_i = 2,4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ <sup>6)</sup>. Der Zusammenhang zwischen Störkonzentration und Lage des Fermi-Niveaus ergibt sich im Erschöpfungs-HL zu

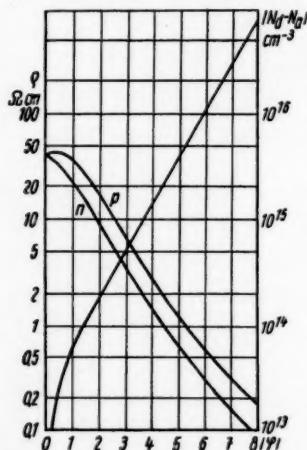


Abb. 2. Zusammenhang zwischen Leitfähigkeit, Störstellenkonzentration und Lage des Fermi-Niveaus für Germanium ohne Störstellenkompensation

## 2. Der Potentialverlauf in der Randschicht

Für die Berechnung der Ladungsträgerzahlen und effektiven Beweglichkeiten in der Randschicht ist es notwendig, den Potentialverlauf in der Randschicht zu kennen. Ausgangspunkt hierfür ist die Poisson-Gleichung

$$\operatorname{div} \vec{D} = \rho \quad (6)$$

<sup>5)</sup> J. A. Burton, Proc. Intern. Conf. on Semiconductors Amsterdam, Physica **20**, 801 (1954).

<sup>6)</sup> W. van Roosbroeck, Physic. Rev. **91**, 287 (1953).

<sup>7)</sup> N. B. Prince, Physic. Rev. **92**, 681 (1953); **93**, 1204 (1954).

mit

$$\varrho = e (N_d - N_a - n_H e^{-u} + p_H e^u) \quad (7)$$

für vollständig dissozierte Störstellen.

Im neutralen HL-Innen ist  $u = 0$ . Für  $u > 0$  nimmt die Anzahl der Löcher zu und die der Elektronen ab, also ist  $\varrho > 0$ ; für  $u < 0$  ist es umgekehrt. Wegen

$$\vartheta = \frac{e \varepsilon}{k T} \operatorname{grad} u \quad (8)$$

wird die Poisson-Gleichung im eindimensionalen Fall

$$\frac{d^2 u}{dz^2} = \frac{e^2}{\varepsilon k T} (N_d - N_a - n_H e^{-u} + p_H e^u). \quad (9)$$

Die erste Integration wird mit der Bedingung  $u' = 0$  für  $u = 0$  durchgeführt und ergibt

$$u' = \pm e \sqrt{\frac{2}{\varepsilon k T}} \sqrt{(N_d - N_a) u - n_H (1 - e^{-u}) + p_H (e^u - 1)}. \quad (10)$$

Für  $u > 0$  gilt das negat. Vorzeichen, für  $u < 0$  das positive Vorzeichen. Der Ausdruck unter der Wurzel ist für beliebige  $u$  stets  $\geq 0$ .

Die weitere Integration ist geschlossen nicht durchführbar. Zur näherungsweisen Integration werden für den Radikanden in Gl. (10) folgende Näherungsausdrücke verwendet:

- a)  $(n_H + p_H) u^2/2$  für kleine Werte von  $|u|$
- b)  $(N_d - N_a) u$  im Erschöpfungsgebiet
- c)  $n_H e^{-u}$  bzw.  $p_H e^u$  in Elektronen-Anreicherungsschichten auf  $n$ -Material bzw. in Löcheranreicherungsschichten auf  $p$ -Material und in Inversionsschichten.

Die Berechnungen haben gezeigt, daß man am besten die Näherung a) für  $|u| \leq 2$  benutzt und daran je nach dem Wert von  $N_d - N_a$  entweder b) oder c) anschließt. Der Übergang von der Erschöpfungsschicht zur Inversionsschicht wird für den Wert  $u_i$  vorgenommen, für den „Näherung b) = Näherung c)“ ist.

a) Die Näherungslösung für den Fall  $|u| \leq 2$ .

Gl. (10) geht in der Näherung a) über in

$$u' = \pm e \sqrt{\frac{n_H + p_H}{\varepsilon k T}} u = \pm \frac{1}{l_0} u \quad (11)$$

mit

$$l_0 = 1/e \sqrt{\frac{\varepsilon k T}{n_H + p_H}} = 1/e \sqrt{\frac{\varepsilon k T}{2 n_i}} \frac{1}{\sqrt{\cosh \varphi}} = L / \sqrt{\cosh \varphi}. \quad (12)$$

Als Lösung hiervon ergibt sich einheitlich für positive und negative  $u$

$$u = u_s e^{-z/l_0}. \quad (13)$$

$u_s$  ist der Wert von  $u$  an der Ofl. Die exakte Lösung im Bereich  $|u| \leq 2$  kann man sich durch Gl. (13) mit ortsabhängigem  $l_0$  gegeben denken. Ein Vergleich von Gl. (11) mit Gl. (10) zeigt, daß dieses exakte  $l_0$  für  $|u| = 2$  um höchstens 30% von dem in Gl. (12) gegebenen Wert abweicht.

b) Die Näherungslösung für  $|u| > 2$  im Erschöpfungsgebiet.

Ein Erschöpfungsgebiet tritt für  $n$ -HL bei Elektronen-Verarmung, für  $p$ -HL bei Löcher-Verarmung dann auf, wenn die Raumladung nur durch die Störkonzentration bestimmt ist. Die Bedingung hierfür ist

$$|N_d - N_a| > n_i e^{-|\varphi|+2}. \quad (14)$$

Wegen Gl. (5) erhält man für  $|\varphi|$  die Forderung  $|\varphi| > 1,1$ . Gl. (10) geht in dieser Näherung über in

$$u' = \pm e \sqrt{\frac{2(N_d - N_a)}{\varepsilon k T}} u = \pm 2 e \sqrt{\frac{n_i \sinh \varphi}{\varepsilon k T}} u, \quad \pm \text{ für } u \leq 0. \quad (15)$$

Die Lösung für positive und negative  $u$  zusammengefaßt ist

$$|u| = e^2 \frac{|N_d - N_a|}{2 \varepsilon k T} (z - d)^2 = e^2 \frac{n_i \sinh |\varphi|}{\varepsilon k T} (z - d)^2. \quad (16)$$

Die Schichtdicke, in der das Potential von seinem Wert an der Obfl. auf den Wert  $\pm 2$  abfällt, ist

$$d_s = l_0 \sqrt{2 \operatorname{ctgh} |\varphi|} (\sqrt{|u_s|} - \sqrt{2}). \quad (17)$$

Da  $|\varphi| > 1,1$ , ist  $\operatorname{ctgh} |\varphi| \approx 1$  und es wird

$$d_s = l_0 (\sqrt{2|u_s|} - 2). \quad (18)$$

Gegenüber dem Fall a) ergibt sich hier eine merkliche Änderung der Randschichtdicke mit der Größe der Bandverbiegung.

Die Lösungen (13) und (16) gehen mit stetiger Tangente ineinander über. Der Übergang zur Inversionsschicht wird für den Wert von  $|u_i|$  vorgenommen, für den

$$|N_d - N_a| |u_i| = n_i e^{-|\varphi|+|u_i|} \quad (19)$$

ist, oder unter Zuhilfenahme von Gl. (5)

$$e^{|u_i|} / |u_i| = 2 (e^{2|\varphi|} - 1). \quad (20)$$

c) Näherungslösung für  $|u| > 2$  bei Anreicherungs- und Inversionsschichten.

Die folgende Näherung findet Anwendung für Elektronen-Anreicherung auf  $n$ -Material und Löcher-Anreicherung auf  $p$ -Material sowie für Inversionsschichten; also für alle in b) nicht behandelten Fälle. Bestimmen die Löcher die Raumladung, dann wird aus Gl. (10)

$$u' = -e \sqrt{\frac{2 p_H}{\varepsilon k T}} e^{u/2} = -1/L e^{(u-\varphi)/2} \quad u > 0. \quad (21)$$

Bestimmen die Elektronen die Raumladung, dann ist

$$u' = e \sqrt{\frac{2 n_H}{\varepsilon k T}} e^{-u/2} = 1/L e^{-(u-\varphi)/2} \quad u < 0. \quad (22)$$

Die Lösung kann für beide Fälle wieder zusammengefaßt werden zu

$$e^{-|u|/2} - e^{-|u_s|/2} = e^{\pm \varphi/2} \cdot z/2 L \quad \pm \text{ für } u \leq 0. \quad (23)$$

Dabei gilt das Pluszeichen für Anreicherungs- und Inversionsschichten der Elektronen, das Minuszeichen für solche der Löcher.

Schließt die Anreicherungs- bzw. Inversionsschicht direkt an den Wert  $|u| = 2$  an, dann ist die Dicke dieser Schicht nach Gl. (23) unter Berücksichtigung von Gl. (12)

$$d_a = 2 l_0 \sqrt{\cosh \varphi} e^{\pm \varphi/2} (e^{-1} - e^{-|u_s|/2}) \quad \pm \text{ für } u \geq 0. \quad (24)$$

Beginnt die Inversionsschicht erst für den Wert  $u_i$  (Anschluß an Erschöpfungsschicht), dann ist ihre Dicke

$$d_i = 2 l_0 \sqrt{\cosh \varphi} e^{\pm \varphi/2} (e^{-|u_i|/2} - e^{-|u_s|/2}) \quad \pm \text{ für } u \geq 0. \quad (25)$$

Aus den in a), b) und c) gegebenen Lösungen läßt sich der gesamte Verlauf des Randschichtpotentials ermitteln. Abb. 3 gibt eine solche Schar von

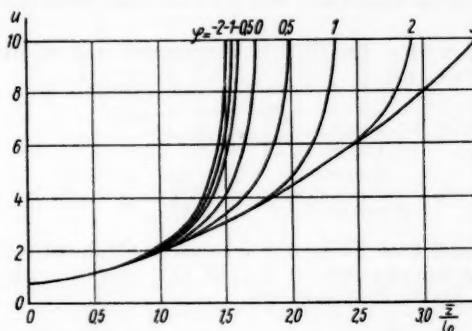


Abb. 3. Der Potentialverlauf in der Randschicht für verschiedene Werte des Parameters  $\varphi$ . Die Kurve für  $\varphi = -2$  gilt gleichzeitig für alle  $\varphi \leq -2$

Potentialverläufen für  $u > 0$  (Parameter  $\varphi$ ). Der Nullpunkt der Abszisse ist so gewählt, daß man für  $\bar{z}/l_0 \geq 1$  direkt die Randschichtdicke entnehmen kann:

$$\begin{aligned} l_e &= l_0 + d_e && \text{bei Erschöpfungsschichten} \\ l_a &= l_0 + d_a && \text{bei Anreicherungsschichten} \\ l_i &= l_0 + d_e + d_i && \text{bei Inversionsschichten.} \end{aligned} \quad (26)$$

Der Zusammenhang zwischen der Ortskoordinate  $z$  und der im Diagramm verwendeten Koordinate  $\bar{z}$  ist

$$z = \bar{z} (u_s) - \bar{z}. \quad (27)$$

Es ist zu beachten, daß  $l_0$  und damit der Maßstab der Abszisse nach Gl. (12) von  $\varphi$  abhängt. Für  $u < 0$  erhält man die entsprechende Kurvenschar unter Berücksichtigung der aus Symmetriegründen unmittelbar einleuchtenden Beziehung  $z(-u, \varphi) = z(u, -\varphi)$ .

### 3. Bestimmung der Ladungsträgerzahl in der Randschicht

Nunmehr läßt sich die Anzahl der Ladungsträger in der Randschicht in Abhängigkeit von der Bandverbiegung berechnen. Es ist hier zweckmäßig, die Abweichung von der Anzahl bei ungeladener Obfl. pro Flächeneinheit der

Obfl. anzugeben. Die Anzahl der zusätzlichen Löcher ist also

$$\delta P = \int_0^\infty (p - p_H) dz = p_H \int_0^\infty (e^u - 1) dz = n_i e^{-\varphi} \int_0^\infty (e^u - 1) dz \quad (28)$$

und die Anzahl der zusätzlichen Elektronen

$$\delta N = \int_0^\infty (n - n_H) dz = n_H \int_0^\infty (e^{-u} - 1) dz = n_i e^\varphi \int_0^\infty (e^{-u} - 1) dz. \quad (29)$$

Zwischen  $\delta N$  und  $\delta P$  besteht die Beziehung

$$\delta N(u, \varphi) = \delta P(-u, -\varphi). \quad (30)$$

Es genügt also,  $\delta P$  zu berechnen, und  $\delta N$  dann mit Hilfe von Gl. (30) zu bestimmen.

Für  $|u| \leq 2$  wird  $u$  aus Gl. (13) entnommen und es wird mit Berücksichtigung von Gl. (12)

$$\begin{aligned} \delta P &= n_i L \frac{e^{-\varphi}}{\sqrt{\cosh \varphi}} u_s \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2(n-1)!} u_s^{n-1} \\ &= n_i L \frac{e^{-\varphi}}{\sqrt{\cosh \varphi}} u_s \left(1 + \frac{u_s}{4} + \frac{u_s^2}{18} + \frac{u_s^3}{96} + \frac{u_s^4}{600} + \dots\right). \end{aligned} \quad (31)$$

Für  $u > 2$  sind zwei Fälle,  $\varphi < 1,1$  und  $\varphi > 1,1$ , zu unterscheiden. Im Fall  $\varphi < 1,1$  entnimmt man  $u$  der Gl. (23) und es ergibt sich unter Berücksichtigung der Gl. (24) und (12)

$$\begin{aligned} \delta P - \delta P_2 &= p_H \int_0^{d_s} \left[ \left( e^{-u_s/2} + \frac{z}{2L e^{\varphi/2}} \right)^{-2} - 1 \right] dz \\ &= n_i L 4 e^{-\varphi/2} \left( \cosh \frac{u_s}{2} - \cosh 1 \right) \quad u_s > 2, \varphi < 1,1. \end{aligned} \quad (32)$$

$\delta P_2$  ist der Wert von  $\delta P$  für  $u = 2$ .

Für  $\varphi > 1,1$  wird das Potential durch die Erschöpfungsschicht der Elektronen bestimmt und  $u$  der Gl. (16) entnommen. Damit wird unter Berücksichtigung von Gl. (18) und (12)

$$\begin{aligned} \delta P - \delta P_2 &= p_H \int_0^{d_s} (e^{u_s(1-z/d_s)} - 1) dz, \quad u_{n,i} > u_s > 2, \varphi > 1,1. \\ &= n_i L \frac{e^{-\varphi}}{\sqrt{\cosh \varphi}} \sqrt{2} \left( \int_{\sqrt{2}}^{\sqrt{u_s}} e^y dy + \sqrt{2} - \sqrt{u_s} \right) \end{aligned} \quad (33)$$

Das hier auftretende Integral wurde in Abhängigkeit von der oberen Integrationsgrenze numerisch integriert. Das Ergebnis ist in Abb. 4 angegeben.

Für  $u_s \geq 4$  ist gut brauchbar

$$\int_{\sqrt{2}}^{\sqrt{u_s}} e^y dy = 2 e^{0,94(u_s-2)}. \quad (34)$$

Für den Wert  $u_{n,i}$  geht die Erschöpfungsschicht in eine Inversionsschicht über und  $u$  wird aus Gl. (23) entnommen. Unter Berücksichtigung von Gl. (25)

und (12) ergibt sich

$$(28) \quad \delta P - \delta P_{u_{ni}} = p_H \int_0^{d_s} \left[ \left( e^{-|u_s|/2} + \frac{z}{2 L e^{-\varphi/2}} \right)^2 - 1 \right] dz = n_i L 4 e^{-\varphi/2} \left( \cosh \frac{u_s}{2} - \cosh \frac{u_t}{2} \right) \quad u_s > u_{ni}, \varphi > 1,1. \quad (35)$$

(29)

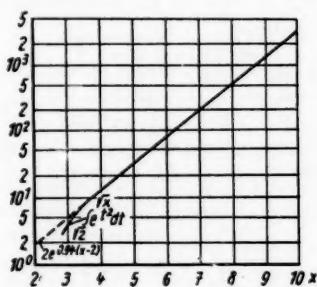


Abb. 4. Ergebnis der numerischen

Integration von  $\int_0^{d_s} e^{t^2} dt$

(30)  
u be-  
rück-

(31)

1. Im  
r Be-

t der  
er Be-

(33)

Inte-  
geben.

nt über

Gl. (25)

Für  $u < -2$  sind wieder die beiden Fälle  $\varphi < -1,1$  und  $\varphi > -1,1$  zu unterscheiden. Im Fall  $\varphi > -1,1$  entnimmt man  $u$  der Gl. (23). Mit Berücksichtigung der Gl. (24) und (12) ergibt sich

$$(32) \quad \delta P - \delta P_{-2} = p_H \int_0^{d_s} \left[ \left( e^{-|u_s|/2} + \frac{z}{2 L e^{-\varphi/2}} \right)^2 - 1 \right] dz = - n_i L 2 e^{-3\varphi/2} [e^{-1} - e^{-|u_s|/2} - 1/3 (e^{-3} - e^{-3|u_s|/2})] \quad (36)$$

$u_s < -2, \varphi > -1,1.$

Für  $\varphi < -1,1$  wird das Potential durch die Erschöpfungsschicht der Löcher bestimmt und  $u$  wird Gl. (16) entnommen. Damit wird unter Berücksichtigung von Gl. (18) und (12)

$$(33) \quad \delta P - \delta P_{-2} = p_H \int_0^{d_s} (e^{-|u_s|(1-z/d)^2} - 1) dz = - n_i L \frac{e^{-\varphi}}{\sqrt{\cosh \varphi}} \sqrt{\frac{2}{\sqrt{|u_s|} - \sqrt{2} - \int_0^{\sqrt{|u_s|}} e^{-y^2} dy}}. \quad (37)$$

Für den Wert  $u_{pi}$  geht die Erschöpfungsschicht in eine Inversionsschicht über,  $u$  wird aus Gl. (23) entnommen. Es ergibt sich unter Berücksichtigung von Gl. (25) und (12).

$$(34) \quad \delta P - \delta P_{u_{pi}} = p_H \int_0^{d_s} \left[ \left( e^{-|u_s|/2} + \frac{z}{2 L e^{-\varphi/2}} \right)^2 - 1 \right] dz = - n_i L 2 e^{-3\varphi/2} [e^{-|u_i|/2} - e^{-|u_s|/2} - 1/3 (e^{-3|u_i|/2} - e^{-3|u_s|/2})] \quad (38)$$

$u < u_{pi}, \varphi > -1,1.$

Die bei den Berechnungen stets wieder auftretenden Funktionen

$$g_1(t) = t \left( 1 + \frac{t}{4} + \frac{t^2}{18} + \frac{t^3}{96} + \frac{t^4}{600} + \dots \right)$$

$$g_2(t) = \cosh \frac{t}{2} - \cosh 1$$

$$g_3(t) = e^{-1} - e^{-t/2} - 1/3 (e^{-3} - e^{-3t/2}) \quad (39)$$

$$g_4(t) = \int_{\sqrt{2}}^{\sqrt{t}} e^{y^2} dy + \sqrt{2} - \sqrt{t}$$

$$g_5(t) = \sqrt{t} - \sqrt{2} - \int_{\sqrt{2}}^{\sqrt{t}} e^{-y^2} dy$$

sind in Abb. 5 angegeben.

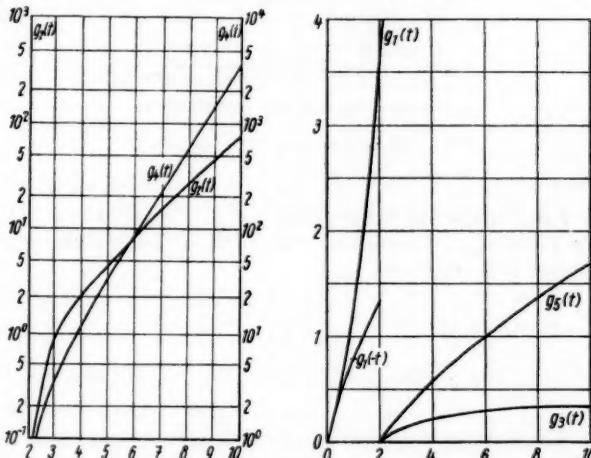


Abb. 5. Die Funktionen  $g_1(t), \dots, g_5(t)$  nach Gl. (39)

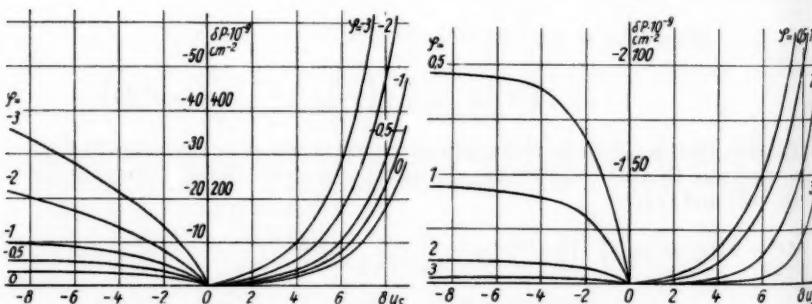


Abb. 6. Gesamtzahl der Löcher in der Randschicht in Abhängigkeit von der Bandverbiegung für gebräuchliche Werte von  $\varphi$  bei Germanium

$\delta P$  in Abhängigkeit von  $u_s$  für gebräuchliche Werte des Parameters  $\varphi$  ist in Abb. 6 für Germanium angegeben. Den Berechnungen wurde zugrunde gelegt

$$\epsilon_{\text{rel}} = 15 \quad n_i = 2,4 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3} \quad \mu_n = 3800 \frac{\text{cm}^2}{\text{V sec}} \quad \mu_p = 1820 \frac{\text{cm}^2}{\text{V sec}}. \quad (40)$$

Sind  $\delta P$  und  $\delta N$  bekannt, dann läßt sich auch sofort die in der Randschicht befindliche Ladung  $Q_r$  bestimmen. Es ist

$$Q_r = e (\delta P - \delta N). \quad (41)$$

Ebenso läßt sich die Obfl.-Leitfähigkeit ohne Berücksichtigung der Streuung der Ladungsträger an der Obfl. nach Gl. (1) nunmehr berechnen.

#### 4. Berechnung der Verteilungsfunktion

Zur Berechnung der effektiven Beweglichkeit benötigt man weiter die Verteilungsfunktion. Ausgangspunkt für die Berechnung der Verteilungsfunktion  $f$  ist die Boltzmann-Gleichung

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{q}{m} E_x \frac{\partial f}{\partial v_x} + \frac{q}{m} E_z \frac{\partial f}{\partial v_z} = - \frac{f - f_0}{\tau}. \quad (42)$$

$z$  ist wieder die Koordinate senkrecht zur Obfl.,  $z = 0$  die Gleichung der Obfl. In  $x$ -Richtung fließt der Strom,  $q$  ist die Ladung der Elektronen bzw. Löcher.  $\tau$  ist die Relaxationszeit, die im allgemeinen noch von der Geschwindigkeit abhängt. Im folgenden soll jedoch  $\tau = \text{const}$  angenommen werden, die Feldabhängigkeit der Beweglichkeit also unberücksichtigt bleiben.  $f_0$  ist die Verteilung im Gleichgewicht, also für  $E_x = 0$ :

$$f_0 = C e^{-\frac{m}{2\pi k T} v^2 \pm u}, \quad \begin{array}{l} + \text{ für Elektronen} \\ - \text{ für Löcher} \end{array} \quad (43)$$

$C$  bestimmt sich aus der Dichte der Ladungsträger im neutralen HL zu

$$C = n_i e^{\pm \varphi} \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{-3/2}, \quad \begin{array}{l} + \text{ für Elektronen} \\ - \text{ für Löcher} \end{array} \quad (44)$$

Die folgenden Rechnungen sollen für Löcher durchgeführt werden. Die Ergebnisse für Elektronen erhält man dann auf Grund der bereits erwähnten Symmetrie.

Mit dem Ansatz  $f = f_0 + f_1$  und unter Berücksichtigung der Koordinatentransformation

$$v_x' = \frac{m}{2} v_x^2 - e E_x x \quad (E_x = \text{const}) \quad v_z = \frac{m}{2} v_z^2 + k T (u - u_s) \quad (45)$$

geht (42) über in

$$\frac{e}{m} E_x \frac{\partial f_1}{\partial v_x} + \frac{e}{m} E_z \frac{\partial f_1}{\partial v_z} + \frac{f_1}{\tau} = \frac{e}{k T} E_x v_x f_0 \quad f_1 = f_1 (v_x, \dots, v_z, \dots). \quad (46)$$

Die statistische Streuung an der Obfl. fordert, daß  $f_1 = 0$  wird an der Obfl.; die Verteilung geht in die reine statistische Verteilung  $f_0$  über. Da man sich im vorliegenden Falle auf eine Lösung beschränken kann, die linear in  $E_x$  ist, kann in der Differentialgleichung (46) das Produkt  $E_x \cdot \partial f_1 / \partial v_x$  ver-

nachläßigt werden. Die so vereinfachte Differentialgleichung lautet

$$\frac{e}{m} E_z \frac{d f_1}{d v_z} + \frac{f_1}{\tau} = \frac{e}{k T} E_x v_x f_0. \quad (47)$$

Für den vorliegenden Fall genügt es weiter, diese Differentialgleichung unter der Bedingung  $E_z = \text{const}$  zu integrieren. Damit wird eine Geschwindigkeitsverteilung in einer idealisierten Randschicht (Abb. 7) betrachtet. Die Lösung unter der vorgegebenen Bedingung an der Obfl. ist

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{e \tau}{k T} E_x v_x f_0 \left( 1 - e^{\frac{m}{e \tau E_z} \left( \sqrt{v_z^2 - \frac{2e}{m} E_z z} - v_z \right)} \right), & \frac{m}{2} v_z^2 &\geq e E_z z, \\ f_1 &= \frac{e \tau}{k T} E_x v_x f_0, & \frac{m}{2} v_z^2 &< e E_z z. \end{aligned} \quad (48)$$

Der Unterschied in den Verteilungsfunktionen für  $\frac{m}{2} v_z^2 >$  bzw.  $< e E_z z$  hat folgende Ursache. Die Ladungsträger, für die  $\frac{m}{2} v_z^2 < e E_z z$  ist, können

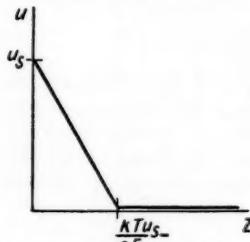


Abb. 7. Idealisierter Potentialverlauf

wegen zu kleiner kinetischer Energie nicht zur Obfl. gelangen und darum nicht am Streuprozeß teilnehmen. Ihre Gleichgewichtsverteilung wird nur durch das elektrische Feld  $E_z$  gestört. Der Exponentialterm in der oberen Gl. (48) gibt also den Einfluß der Streuung an der Obfl. wieder.

Im Grenzfall  $E_z$  gegen Null ergibt sich

$$f_1 = \frac{e \tau}{k T} E_x v_x f_0 \left( 1 - e^{-\frac{z}{\tau |v_z|}} \right). \quad (49)$$

Hierin bedeutet  $f_0$  den Wert von  $f_0$  für  $u = 0$ . Durch  $f_1$  wird wegen  $\int_{-\infty}^{\infty} f_1 dv_x = 0$  keine Konzentrationsänderung der Ladungsträger bewirkt und es gilt darum weiterhin

$$p(z) = p_H e^{u(z)}. \quad (50)$$

### 5. Einführung der effektiven Beweglichkeit

Die Stromdichte im Abstand  $z$  von der Obfl. ist

$$\begin{aligned} i_{p_x}(z) &= e \int_{-\infty}^{\infty} v_x f_1 dv_x dv_y dv_z \\ &= \frac{e^2 \tau}{k T} E_x \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 f_0 \left( 1 - e^{\frac{m}{e \tau E_z} \left( \sqrt{v_z^2 - \frac{2e}{m} E_z z} - v_z \right)} \right) dv_x dv_y dv_z \\ &= e \mu_p p(z) E_x \left( 1 - 1/\sqrt{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2 + \alpha(\sqrt{t^2 - e E_z z / k T} - t)} dt \right) \\ &= \sqrt{\frac{m}{2 k T}} v_z \quad \alpha = \frac{\sqrt{2 m k T}}{e \tau E_z}. \end{aligned} \quad (51)$$

Hierbei wurde die Beziehung

(47)

$$\frac{e}{m} \tau = \mu \quad (52)$$

benutzt. Der erste Term auf der rechten Seite von Gl. (51) gibt die ungestörte Leitfähigkeit, während der Exponentialterm den Einfluß der Stöße mit der Obfl., eine Verminderung der ungestörten Leitfähigkeit, angibt. In der Nähe der Obfl. ist also die Beweglichkeit ortsabhängig. Unter Berücksichtigung der Beziehung

(48)

$$i_{px}(z) = e \mu(z) p(z) E_x \quad (53)$$

und Gl. (51) erhält man

$$\frac{\mu(z)}{\mu} = 1 - 1/\sqrt{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2 + \alpha(\sqrt{t^2 - e E_z z / k T_i} - t)} dt. \quad (54)$$

Für  $z = 0$  ist die Beweglichkeit  $\mu(0) = 0$ . Sie wächst mit größer werdendem Abstand von der Obfl. an, und es wird für große  $z$ :  $\mu(z) = \mu$ .

Für den vorliegenden Fall ist es zweckmäßiger, eine effektive Beweglichkeit zu definieren, die auf den gesamten zusätzlichen Strom in der Randschicht bezogen ist und definiert wird durch

$$I_{px} = \int_0^{\infty} (i_{px}(z) - i_{px}(\infty)) dz = e \mu_{p_{\text{eff}}} \delta P E_x. \quad (55)$$

Schrieffler berechnet effektive Beweglichkeiten, wie sie durch Gl. (55) definiert werden, für zwei Fälle. Einmal für den Fall der Erschöpfungsschicht, deren Potential wie in Abb. 7 gezeigt idealisiert wird, und weiter für größere Bandverbiegungen, bei denen noch ein Inversionsgebiet auftritt. Reine Anreicherungsschichten werden nicht betrachtet. Für das Gebiet kleiner Bandverbiegungen können Schriefflers Rechnungen nicht ohne weiteres übernommen werden. Der hierfür erforderliche Grenzübergang  $u_s \rightarrow 0$ ,  $\alpha \rightarrow 0$  ist nicht durchführbar, da die Lösung ein singuläres Verhalten zeigt und das Modell dann physikalisch auch nicht mehr zulässig ist.

Es soll darum hier ein Weg beschritten werden, der unter Verwendung der Verteilungsfunktion Gl. (49) zu Werten der effektiven Beweglichkeit bei kleinen Bandverbiegungen führt. Zunächst wird ein einfaches Modell betrachtet.

(49)

wegen

ewirkt

(50)

## 6. Vereinfachtes Modell zur Berechnung der effektiven Beweglichkeit in einer dünnen Schicht

Es sei in einer Obfl.-Schicht  $0 \leq z \leq l$  die Dichte der zusätzlichen Löcher konstant, z. B.  $= p_0$ . Der zugehörige Strom ist dann

$$I_{px} = e \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} v_x f_1^0 dv_x dv_y dv_z dz. \quad (56)$$

Hierin ist  $f_1^0$  aus Gl. (49) mit

(51)

$$f_1^0 = p_0 \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{-3/2} e^{-\frac{m}{2kT} v^2} \quad (57)$$

einzusetzen. Gl. (49) und (57) in (56) eingesetzt ergibt

$$I_{px} = \frac{e^2 \tau}{k T} E_x p_0 \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{-3/2} \int_0^l \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 e^{-\frac{m}{2kT} v^2} \left( 1 - e^{-\frac{z}{\tau |v_z|}} \right) dv_x dv_y dv_z dz. \quad (58)$$

Dieser Strom wird aufgeteilt in

$$\bar{I}_{px} = \frac{e^2 \tau}{k T} E_x p_0 \left( \frac{m}{2 \pi k T} \right)^{-3/2} \int_0^l \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 e^{-\frac{m}{2 k T} v^2} dv_x dv_y dv_z dz \quad (59)$$

und

$$\hat{I}_{px} = \frac{e^2 \tau}{k T} E_x p_0 \left( \frac{m}{2 \pi k T} \right)^{-3/2} \int_0^l \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 e^{-\frac{m}{2 k T} v^2 - \frac{z}{\tau |v_z|}} dv_x dv_y dv_z dz. \quad (60)$$

$\bar{I}_{px}$  ist der Strom ohne Berücksichtigung der Stöße an der Obfl. Unter Zuhilfenahme der Gl. (52) und der Tatsache, daß  $p_0 l = \delta P$  ist, wird

$$\bar{I}_{px} = e \mu \delta P E_x. \quad (61)$$

Aus  $\hat{I}_{px}$  wird mit Hilfe von

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (62)$$

und nach Ausführung der Integration über  $z$

$$\hat{I}_{px} = e \mu p_0 E_x \frac{2 \sqrt{m}}{\sqrt{2 \pi k T}} \tau \int_0^{\infty} v_z e^{-\frac{m}{2 k T} v_z^2} \left( 1 - e^{-\frac{l}{\tau v_z}} \right) dv_z. \quad (63)$$

Führt man hier die freie Weglänge  $\lambda = 3/2 \sqrt{\frac{\pi k T}{2m}} \tau$  ein, dann ergibt sich

$$\hat{I}_{px} = e \mu p_0 E_x \frac{4}{3\pi} \lambda \left( 1 - \int_0^{\infty} e^{-t - \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{l}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{t}}} dt \right) \quad (64)$$

mit  $t = \frac{m}{2 k T} v_z^2$  als neuer Integrationsveränderlicher. Der Gesamtstrom ist

$$I_{px} = \bar{I}_{px} - \hat{I}_{px}. \quad (65)$$

Nach der Definition (55) ergibt sich unter Berücksichtigung von Gl. (61) und (64) eine effektive Beweglichkeit in dieser Schicht zu

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} = 1 - \frac{4}{3\pi} \frac{\lambda}{l} \left( 1 - \int_0^{\infty} e^{-t - \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{l}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{t}}} dt \right). \quad (66)$$

Für kleine Werte von  $l/\lambda$ , also dünne Schichten, wird das Integral

$$\int_0^{\infty} e^{-t - \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{l}{\lambda} \frac{1}{\sqrt{t}}} dt \approx 1 - \frac{3\pi}{4} \frac{l}{\lambda} \quad (67)$$

und damit sowohl  $\mu_{\text{eff}}$  als auch  $d\mu_{\text{eff}}/dl = 0$  für  $l/\lambda = 0$ . Für  $l \rightarrow \infty$  geht das Integral gegen Null und damit  $\mu_{\text{eff}}$  gegen  $\mu$ . Dies sind Ergebnisse, die man auch physikalisch erwartet. Mit der neuen Veränderlichen  $x = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{l}{\lambda}$  wird Gl. (66) zu

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi} x} \left( 1 - \int_0^{\infty} e^{-t - x \sqrt{t}} dt \right). \quad (68)$$

Da diese vereinfachte Obfl.-Schicht als Modell für dünne Schichten ihre Bedeutung hat und aus den hier gewonnenen Daten die Näherungsergebnisse

für die realen Randschichten abgeleitet werden, soll Gl. (68) numerisch ausgewertet werden.

Die numerische Berechnung des Integrals

$$F(x) = \int_0^\infty e^{-t-x/\sqrt{t}} dt \quad (69)$$

als Funktion des Parameters  $x$  wurde für Parameterwerte im Bereich  $0,025 \leq x \leq 10$  auf drei Stellen genau durchgeführt. Für  $x > 10$  ist praktisch  $F(x) = 0$ , und damit

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi} x} \quad x > 10. \quad (70)$$

Für  $x < 0,025$  ist praktisch  $\mu_{\text{eff}} = 0$ . Das Ergebnis dieser Integration ist in Abb. 8 angegeben. Die Kreuze geben die berechneten Werte an. Die Berechnung der effektiven Beweglichkeit nach Gl. (68) ist ebenfalls in Abb. 8 dargestellt.

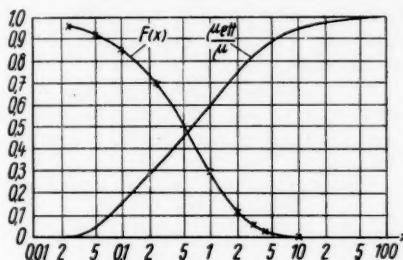


Abb. 8. Ergebnis der numerischen Integration

$F(x) = \int_0^\infty e^{-t-x/\sqrt{t}} dt$  und die effektive Beweglichkeit des vereinfachten Modells für dünne Schichten nach Gl. (68)

## 7. Anwendung des einfachen Modells auf reale Randschichten

Dieses einfache Modell wird nun in folgender Weise für die Berechnung der effektiven Beweglichkeiten in HL-Randschichten für kleine Bandverbiegungen verwendet.

Auch für die allgemeine Randschicht wird die Aufteilung (65) des Stromes vorgenommen. Der Anteil  $\hat{I}_{px}$  ohne Berücksichtigung der Streuung ist wieder  $\hat{I}_{px} = e \mu \delta P E_x$ . Für  $\hat{I}_{px}$  läßt sich eine Abschätzung angeben. Diese Abschätzung muß für  $u_s > 0$  und  $u_s < 0$  getrennt durchgeführt werden. Zunächst wird der Fall  $u_s > 0$  betrachtet, für den an der Obfl. die größte Konzentration herrscht. Man wird sicher  $\hat{I}_{px}$  zu groß ansetzen, wenn es nach Gl. (64) berechnet wird mit  $l$  als Randschichtdicke und  $p_0 = p_s - p_H$ , also der größten Überschußkonzentration. Da die Störung durch Stöße mit der Obfl. im Abstand  $\lambda$  praktisch abgeklungen ist, wird  $\hat{I}_{px}$  sicher zu klein angegeben durch Gl. (64), wenn man für  $p_0$  den Wert  $p_s - p_H$  wählt, wobei  $p_s$  der Konzentrationswert im Abstand  $\lambda$  von der Obfl. ist. Der tatsächliche Wert wird also zwischen diesen beiden Grenzen liegen:

$$\begin{aligned} e \mu (p_s - p_H) E_x \frac{4}{3\pi} \lambda (1 - F(x)) &\leq \hat{I}_{px} \\ &\leq e \mu (p_s - p_H) E_x \frac{4}{3\pi} \lambda (1 - F(x)). \end{aligned} \quad (71)$$

Der obere Wert würde eine zu kleine, der untere Wert eine zu große effektive Beweglichkeit liefern. Wird für  $\hat{I}_{px}$  das arithmetische Mittel aus oberem und

unterem Wert verwendet, dann wird die effektive Beweglichkeit

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} = 1 - \frac{\bar{p}_s - p_H}{\delta P} \frac{4}{3\pi} \lambda (1 - F(x)) \quad u_s > 0. \quad (72)$$

Hierin ist  $\bar{p}_s = 1/2 (p_s + p_A)$ . Spezialisiert man diese Gleichung auf das von Schrieffer verwendete Modell, dann sieht man, daß Gl. (72) für größere Bandverbiegungen in befriedigender Weise in die dort gültige Schrieffer-Formel einmündet. Der Übergang zur Schrieffer-Formel findet dann statt, wenn der Abfall des Potentials am Rande auf einer freien Weglänge größer als  $k T$  wird.

An einem Modell, für das die effektive Beweglichkeit exakt berechnet werden kann, soll die Brauchbarkeit des Vorgehens gezeigt und Wege zur eventuellen Erweiterung des Gültigkeitsbereichs der Formeln aufgezeigt werden.

Gl. (49) legt nahe, in grober Näherung ein Verhalten der Beweglichkeit wie

$$\mu(z) = \mu (1 - e^{-z/\lambda})$$

anzusetzen, wobei  $e^{-z/\lambda}$  den Einfluß der Streuung angibt.

Mit der weiteren Annahme

$$p - p_H = p_0 e^{-z/z_0} \quad (74)$$

— dies entspricht dem linearen Potential der Abb. 7 bei sehr großem  $u_s$  und geeigneter Normierung — wird

$$\hat{I} = e \mu \delta P E_x \frac{\lambda}{\lambda + z_0}. \quad (75)$$

Die effektive Beweglichkeit wird damit

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} = 1 - \frac{\lambda}{\lambda + z_0} = \frac{1}{1 + \lambda/z_0}. \quad (76)$$

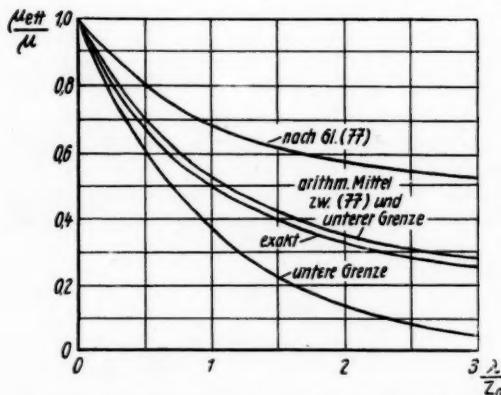


Abb. 9. Vergleich der Näherungen für ein Modell, bei dem die effektive Beweglichkeit exakt berechenbar ist

Wie zu erwarten, wird  $\mu_{\text{eff}} = 0$  für  $z_0 = 0$  und  $\mu_{\text{eff}} = \mu$  für  $z_0 = \infty$ .

Berechnet man für dieses Modell die effektive Beweglichkeit näherungsweise, wie es für den realen Fall oben beschrieben wurde, dann ergibt sich

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} = \frac{1}{2} (1 + e^{-\lambda/z_0}). \quad (77)$$

In Abb. 9 wird diese Näherung mit weiteren Möglichkeiten verglichen. Am besten

hiervom zeigt sich für dieses Modell das arithmetische Mittel aus (77) und der unteren Grenze.

Dieser Vergleich gibt einen Hinweis auf eine Möglichkeit der weiteren Verbesserung der Annäherung der effektiven Beweglichkeit durch das arithmetische Mittel.

Für  $u_s < 0$  muß berücksichtigt werden, daß ein gewisser Teil der Löcher durch das Potential daran gehindert wird, an die Obfl. zu gelangen. Es soll angenommen werden, daß die Löcher im Mittel das Potential  $|u_s - u_\lambda|/2$  zu überwinden haben, und die zum Stoß gelangende Anzahl damit  $(p_s - p_H) e^{-|u_s - u_\lambda|/2}$  wird. Der Näherungswert für die effektive Beweglichkeit wird damit

$$\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} = 1 - \frac{\bar{p}_s - p_H}{\delta P} e^{-|u_s - u_\lambda|/2} \frac{4}{3\pi} \lambda (1 - F(x)) \quad u_s < 0. \quad (78)$$

Für große Werte von  $u_s$  geht  $\mu_{\text{eff}}$  gegen  $\mu$ , für  $u_s = 0$  schließt sich (78) stetig an (72) an. Es ist

$$\lim_{u_s \rightarrow 0} \frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} = \frac{\mu_{\text{eff}0}}{\mu} = 1 - \frac{1}{2} \left( 1 + e^{-\frac{3\sqrt{\pi}}{4x_0}} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi x_0}} (1 - F(x_0)) \quad u_s = 0, \quad (79)$$

wobei  $x_0$  der Wert von  $x$  für  $u_s = 0$  ist.

Nach den Gl. (72), (78) und (79) werden die effektiven Beweglichkeiten für kleine Bandverbiegungen berechnet. Die angeschriebenen Formeln gelten ihrer Herleitung nach für Löcher. Genau genommen hätte man die Größen  $\mu$ ,  $\lambda$  und  $l$  noch mit dem Index  $p$  versehen müssen. Ersetzt man diese Größen durch die entsprechenden der Elektronen und weiter  $\delta P$  durch  $\delta N$ ,  $\bar{p}_s - p_H$  durch  $\bar{n}_s - n_H$ , dann gelten die Gl. (72), (78) und (79) für Elektronen, und zwar Gl. (72) für  $u_s < 0$ , Gl. (78) für  $u_s > 0$ .

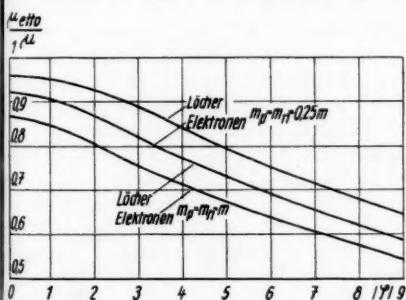


Abb. 10.  $\mu_{\text{eff}0}/\mu$  für Löcher und Elektronen an der Obfl. von Germanium

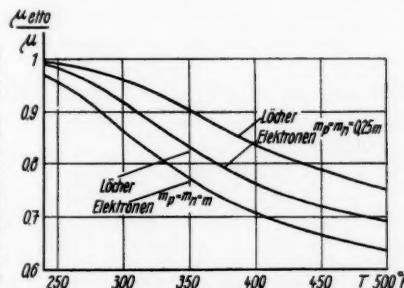


Abb. 11. Die Temperaturabhängigkeit von  $\mu_{\text{eff}0}/\mu$  für eigenleitendes Germanium

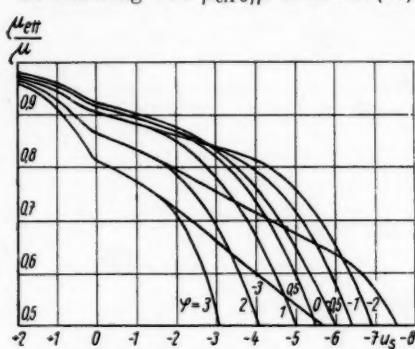
Als Ausgangsdaten für die Berechnung im Falle des Germaniums werden wieder die Werte (40) benutzt. Hieraus ergeben sich die freien Weglängen für Löcher bzw. Elektronen zu  $\lambda_p = 1,32 \cdot 10^{-5} \sqrt{\frac{m_p}{m}} \text{ cm}$  und  $\lambda_n = 2,75 \cdot 10^{-5} \sqrt{\frac{m_n}{m}} \text{ cm}$ . Hierbei sind  $m_p$  und  $m_n$  die effektiven Massen der Löcher und Elektronen, die als Skalar betrachtet werden sollen mit dem Wert  $m_p =$

$m_n = 0,25 m$  in Übereinstimmung mit Schrieffer und anderen Autoren. Effekte, die durch den Tensorcharakter der effektiven Masse hervorgerufen werden<sup>8)</sup>, bleiben hier unberücksichtigt.

Einen ersten Überblick über die Größe des Effektes gewinnt man durch Betrachtung von  $\mu_{\text{eff}0}/\mu$  nach Gl. (79) in Abhängigkeit von  $\varphi$  und der Temperatur. In Abb. 10 ist  $\mu_{\text{eff}0}/\mu$  in Abhängigkeit von  $\varphi$  bei Zimmertemperatur aufgetragen, und zwar für die beiden Fälle  $m_p = m_n = 0,25 m$  und  $m_p = m_n = m$ . Die Werte, die sich für  $m_p = m_n = m$  ergeben, sind die für  $u_s = 0$  kleinstmöglichen Werte der effektiven Beweglichkeit. Für sehr reine Materialien ist also der Effekt bei Zimmertemperatur nicht sehr groß.

Dies ändert sich aber bei höheren Temperaturen. Um einen Überblick hierüber zu geben, soll die Temperaturabhängigkeit der effektiven Beweglichkeit von Löchern und Elektronen für  $u_s = 0$  in eigenleitendem Material angegeben werden. Eigenleitendes Material wird deshalb gewählt, um die Temperaturabhängigkeit von  $\varphi$  zu eliminieren und weiter auch, weil es eine obere Grenze für die effektiven Beweglichkeiten angibt.

Abb. 12. Effektive Beweglichkeit der Elektronen in Abhängigkeit von der Bandverbiegung an der Obfl. von Germanium



in eigenleitendem Material angegeben werden. Eigenleitendes Material wird deshalb gewählt, um die Temperaturabhängigkeit von  $\varphi$  zu eliminieren und weiter auch, weil es eine obere Grenze für die effektiven Beweglichkeiten angibt.

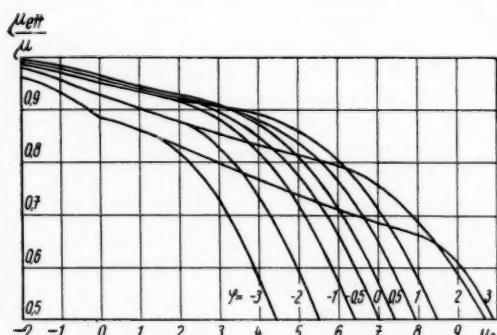
Unter Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit von  $L$  nach Gl. (12) und derjenigen der freien Weglänge im Gebiet der Streuung an Schallquanten, ergibt sich eine Temperaturabhängigkeit von  $x_0$  zu

$$x_0(T) = x_0(300) \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{3/4} e^{7,58(300/T-1)}. \quad (80)$$

Die mit diesem Wert auf Grund der Gl. (79) errechnete Temperaturabhängigkeit ist in Abb. 11 angegeben.

Die effektive Beweglichkeit in Abhängigkeit von der Bandverbiegung  $u_s$  lässt sich nun ebenfalls bestimmen.

Abb. 13. Effektive Beweglichkeit der Löcher in Abhängigkeit von der Bandverbiegung  $u_s$  von Germanium



<sup>8)</sup> J. R. Schrieffer, *Semiconductor Surface Physics*, Hrsg. R. H. Kingston, Philadelphia 1957.

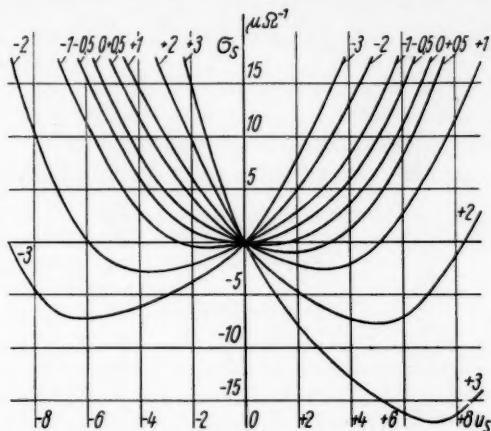


Abb. 14. Obfl.-Leitfähigkeit unter Berücksichtigung der Streuung der Ladungsträger an der Obfl.  $\sigma_s$  in Abhängigkeit von der Bandverbiegung für Germanium

In den Abb. 12 und 13 sind die nach Gl. (72) und (78) berechneten Werte für Elektronen und Löcher für einige gebräuchliche Werte des Parameters  $\varphi$  angegeben.

Nach Gl. (2) ergibt sich nun auch die Obfl.-Leitfähigkeit unter der Annahme statistischer Streuung der Ladungsträger an der Obfl. Diese Obfl.-Leitfähigkeit wurde in Abb. 14 dargestellt. Abb. 15 gibt für eigenleitendes Material einen Vergleich der Obfl.-Leitfähigkeitskurven ohne Modifikation der Beweglichkeit an der Obfl. (Kurve  $\bar{\sigma}_s$ ), Schrieffers Näherung und die hier berechnete Näherung für kleine Bandverbiegungen (Kurve  $\sigma_s$ ).

Herrn Prof. Dr. O. Hachenberg danke ich für das fördernde Interesse, das er der Arbeit entgegenbrachte.

Berlin-Adlershof, Heinrich-Hertz-Institut der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin.

Bei der Redaktion eingegangen am 22. Januar 1959.

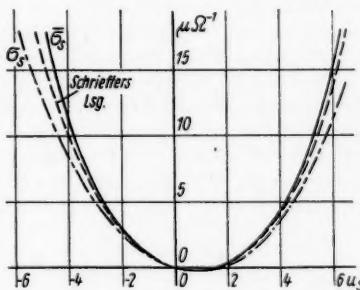


Abb. 15. Vergleich der Obfl.-Leitfähigkeitskurven mit und ohne Berücksichtigung der Streuung und Schrieffers Lösung für eigenleitendes Germanium

# **Feldeffekt und Reaktionen an der Oberfläche von Germanium**

*Von Hans Flietner*

Mit 11 Abbildungen

## **Inhaltsübersicht**

Mit Hilfe des Feldeffektes wurden Reaktionen verfolgt, die an der Oberfläche von Germanium-Proben verschiedener Leitfähigkeit stattfanden. Es wurde festgestellt, daß die Einwirkung von Ozon eine Vergrößerung der Anzahl der „schnellen“ Terme mit sich bringt. Im Fall der nicht mit Ozon vorbehandelten Oberfläche war dieser Zuwachs an „schnellen“ Termen begleitet von einem Verschwinden „langsamer“ Akzeptor-Terme. Diese „langsam“ Akzeptor-Terme, die durch Sauerstoff-Adsorption zu verstehen sind, werden durch die Ozonbehandlung in „schnelle“ Akzeptor-Terme übergeführt, die Bindungsmöglichkeiten von freien Elektronen an freien Valenzen von Oberflächen-Atomen entsprechen. Durch eine feuchte Atmosphäre wird die Wirkung auf die „schnellen“ Terme wieder vollständig rückgängig gemacht. Es bleibt jedoch die Ladung in den „langsam“ Termen erhalten. Dies bedeutet, daß durch die Vermittlung von  $H_2O$  ein Bindungstyp an der Oberfläche entsteht, der keine Ladungsänderung mit sich bringt. Ein Bindungstyp mit diesen Eigenschaften ist die  $GeO_2$ -Bindung. Bei einer mit Ozon und Feuchtigkeit vorbehandelten Oberfläche bewirkt eine erneute Ozonbehandlung ebenfalls eine Vergrößerung der Anzahl der „schnellen“ Terme, jedoch ohne gleichzeitige Ladungsänderung in den „langsam“ Termen. Man versteht dies so, daß Ozon ebenfalls die  $GeO_2$ -Bindung auftrennt, um Bindungsmöglichkeiten für freie Elektronen an freien Valenzen zu schaffen.

## **Einleitung**

Wird auf der Obfl.<sup>1)</sup> eines HL<sup>1)</sup> Ladung induziert, so verbiegen sich die Bänder in einer dünnen Obfl.-Schicht und die Leitfähigkeit ändert sich. Diesen Effekt nennt man Feldeffekt. Mit Hilfe dieses Effektes ist es möglich, die in Obfl.-Terme befindliche Ladung in Abhängigkeit von der Lage des Fermi-Niveaus zu bestimmen<sup>2)</sup>. Diese Kenntnis ermöglicht Aussagen über Lage, Dichte und Charakter der Obfl.-Terme. Insbesondere ist es möglich, an der Obfl. stattfindende Reaktionen zu verfolgen.

<sup>1)</sup> Die Termini „Oberfläche“ und „Halbleiter“ und ihre Ableitungen sind im folgenden ihrer Häufigkeit wegen stets mit „Obfl.“ und „HL“ abgekürzt.

<sup>2)</sup> W. L. Brown, Physic. Rev. **100**, 590 (1955).

Das Modell, das heute für Obfl.-Untersuchungen herangezogen wird, ist in Abb. 1 gezeigt<sup>3)</sup>).

Auf der Obfl. des Kristalls befinden sich zusätzliche Terme, deren Energieniveaus im Gebiet der verbotenen Zone liegen. Diese Terme nehmen dadurch Einfluß auf die elektrischen Eigenschaften, daß sie Elektronen mit dem HL austauschen. Hierdurch entsteht an der Obfl. eine Raumladungsschicht. Die Bandverbiegung wird durch die Gesamtladung auf der Obfl. und die Obfl.-Terme festgelegt. Diese Obfl.-Terme kann man nach ihren Reaktionszeiten in zwei Klassen einteilen: In die sogenannten „langsamem“ Terme, deren Reaktionszeiten zwischen 0,1 sec und einigen Minuten liegen, und in die „schnellen“ Terme mit Reaktionszeiten in der Größenordnung von 10  $\mu$ sec. Die Anzahl der „langsamem“ Terme ist  $10^{13}$ – $10^{14}$  cm $^{-2}$ . Über ihre energetische Lage ist noch wenig bekannt<sup>5)</sup>, Ref. Bardeen. Die Anzahl der „schnellen“ Terme ist viel geringer, doch gelang es, genauere Angaben über ihre Lage und Dichte zu machen. Es gibt im wesentlichen eine stetige Verteilung um die Bandmitte herum mit einer Dichte von  $10^{11}$ – $10^{12}$  cm $^{-2}$  eV $^{-1}$  und weitere Terme in größerer Dichte in einem Abstand von der Bandmitte, der größer ist als etwa 0,1 eV<sup>4)</sup>, Ref. Garrett.

Anlaß zu den vorliegenden Untersuchungen war die Feststellung des Effektes, daß Ozon eine Veränderung der Obfl.-Leitfähigkeitskurven im Feldeffekt bewirkte, die auf eine Änderung des Spektrums der „schnellen“ Terme schließen ließ. Da sich einerseits im Feldeffekt eine Änderung der Konzentration und Lage der „schnellen“ Terme gut verfolgen läßt, andererseits eine chemische Reaktion die Terme verändert, versprachen diese Untersuchungen einige Aufschlüsse über die Bindungsverhältnisse.

Man kennt schon länger Einflüsse, die die „schnellen“ Terme verändern, z. B. Schmiegeln und Ätzen. Wang und Wallis<sup>6)</sup> fanden weiter eine Änderung der „schnellen“ Terme kurz nach dem Ätzen. Erst einige Zeit nach dem Ätzen ist also die Termstruktur auf der Obfl. stabil, d. h. zeigt keine vom Ätzprozeß mehr herrührende Veränderungen. Die hier beschriebenen Änderungen der „schnellen“ Terme wurden an stabilen Obfl. herbeigeführt. Nach der Veränderung der Termstruktur durch Ozon konnte durch bloßen Wechsel der umgebenden Atmosphäre die Ausgangssituation wieder hergestellt

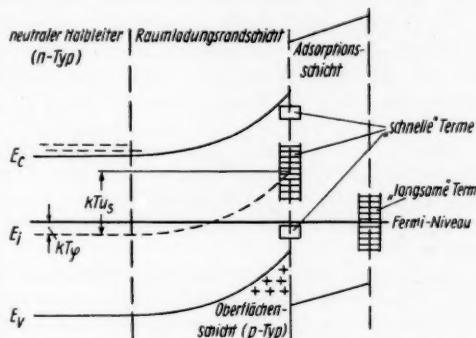


Abb. 1. Das Termschema der freien HL-Obfl.

<sup>3)</sup> R. H. Kingston, Review of Germanium Surface Phenomena, J. Appl. Phys. **27**, 101 (1956).

<sup>4)</sup> Semiconductor Surface Physics, Hrsg. R. H. Kingston, Philadelphia 1957.

<sup>5)</sup> Intern. Koll. üb. Halbleiter u. Phosphore, Garmisch-Partenkirchen 1956.

<sup>6)</sup> S. Wang, G. Wallis, Physic. Rev. **107**, 947 (1957).

werden, d. h. die an der Obfl. ablaufenden Reaktionen wurden reproduzierbar beherrscht.

Bei der Ermittlung der Lage der Fermi-Niveaus an der Obfl. relativ zu den Bändern aus den gemessenen Obfl.-Leitfähigkeitskurven wurde die Streuung der Ladungsträger an der Obfl. berücksichtigt<sup>7)</sup>.

### 1. Vorbereitung der Proben

Als Ausgangsmaterial wurden Germanium-Einkristallscheiben bekannter Kristallorientierung von etwa 0,5 mm Stärke verwendet. Diese Scheiben wurden rechteckig auf etwa 6×12 mm zurechtgeschnitten, mit feinem Schmirgel auf etwa 0,3 mm Dicke abgeschmiregt und anschließend poliert. Als letzte Obfl.-Behandlung folgte eine Ätzung mit CP 4 und gründliche Spülung in destilliertem Wasser. Eine Verfolgung des Ätzprozesses mit Mikroaufnahmen ergab, daß eine Ätzzeit von 1,5–2 Minuten am günstigsten ist. Nach Durchführung einer Anzahl Messungen wurden die Proben oft von neuem fein geschmiregt und geätzt, so daß im Mittel die Dicke der Proben 0,15 bis 0,2 mm war.

Abb. 2 und 3 zeigen eine Obfl.-Aufnahme in etwa achtzigfacher Vergrößerung und eine interferenzmikroskopische Aufnahme einer so behandelten Obfl. Zwischen je zwei Linien der interferenzmikroskopischen Aufnahme ist

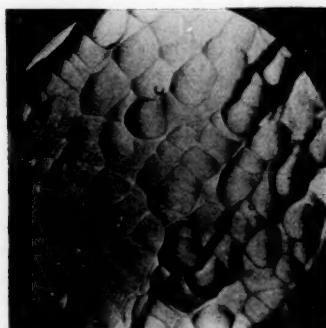


Abb. 2. CP 4-geätzte Germanium-Obfl. (Vergr. etwa 80fach)



Abb. 3. Interferenzmikroskopische Aufnahme einer CP 4-geätzten Germanium-Obfl. (Vergr. etwa 80fach)

eine Höhendifferenz von  $1/2 \mu$ . Während bei der geätzten Obfl. Höhenschwankungen von nur etwa  $\pm 3 \mu$  auftreten, betragen sie bei mittelfeinem Schmirgel etwa das 5- bis 10fache. Es läßt sich weiter abschätzen, daß die reale geätzte Obfl. nur einen unwesentlich größeren Flächeninhalt hat als die sie idealisierende Ebene, während das Verhältnis bei einer geschmiregten Obfl. einen Faktor 5–10 ausmachen kann. Die geätzten Obfl. hatten im Durchschnitt eine Obfl.-Rekombinationsgeschwindigkeit von 100 cm/sec (gemessen nach der Methode von van Roosbroeck<sup>8)</sup>.

Die fertig bearbeitete Probe wurde mit Ohmschen Kontakten versehen.

<sup>7)</sup> H. Flietner, Ann. Physik 3, 396 (1959).

<sup>8)</sup> W. van Roosbroeck, Physic. Rev. 101, 1713 (1956).

## 2. Apparatur zur Messung des Feldeffektes

Die so vorbereitete Probe wurde in den im Meßgefäß befindlichen Feldkondensator eingebracht. Hier wurde sie gegenüber einer Metallelektrode angebracht, so daß Metallelektrode und Probe einen Kondensator bildeten. Als Dielektrikum wurde, je nach den Absichten, entweder Luft (bzw. die entsprechende Atmosphäre) oder  $\text{SrTiO}_3$  ( $\epsilon_{\text{rel}} = 300$ ) verwendet. Die wirksame Kondensatorfläche war  $1/2$  bzw.  $1 \text{ cm}^2$ , je nachdem sich nur auf einer bzw. auf beiden Seiten der Probe Elektroden befanden. In Luft ergab sich bei Ausnutzung von nur einer Probenseite eine Kapazität von einigen  $\text{pF}$ , bei Verwendung von  $\text{SrTiO}_3$  etwa  $50 \text{ pF}$ . Der Faktor 300 konnte sich nicht voll auswirken, da die  $\text{SrTiO}_3$ -Folien nicht so dünn gemacht werden konnten wie der Luftspalt ( $0,1 \text{ mm}$ ).

Das Meßgefäß war abgedunkelt, um inneren und Obfl.-Photoeffekt zu vermeiden. Durch dieses Gefäß wurde das Gas geleitet, dessen Wirkung auf die Obfl. untersucht werden sollte. Das Ausgangsgas war reines  $\text{N}_2$  und  $\text{O}_2$ . Für die Trocknung wurde das Gas über  $\text{CaCl}_2$ , Silikagel und  $\text{P}_2\text{O}_5$  geleitet. Ein Haarhygrometer kontrollierte die Trocknung. Dann lief das Gas durch ein Glasgefäß, in dem eine Quecksilber-Niederdrucklampe zur Erzeugung von Ozon eingebaut war. Feuchtes Gas wurde erzeugt, indem das Ausgangsgas durch Wasser hindurchgeleitet wurde. Um eine Kondensation im Meßgefäß weitgehend zu verhindern, war eine Flasche mit kleinen Glasperlen vorgeschaftet.

Die Gasgeschwindigkeiten lagen je nach Absicht zwischen 2 und 10 Litern pro Stunde. Eine Abhängigkeit des Effektes von der Gasgeschwindigkeit und eventuell damit verbundenen Temperaturschwankungen wurde nicht festgestellt. Die Messungen fanden bei Zimmertemperatur statt.

Das trockene Gas hatte eine relative Feuchte unter 5%, das feuchte über 95%. Damit ist man sicher, die hierdurch erzielbare größtmögliche Bandverbiegung erreicht zu haben<sup>9)</sup>.

Der elektrische Teil der Apparatur registrierte oszillographisch in einer Brückenschaltung die Leitwertänderung der Probe in Abhängigkeit von der auf der Proben-Obfl. induzierten Ladung. Die Spannung am Feldkondensator war sinusförmig, ihr Effektivwert etwa 40–60 V, ihre Frequenz zwischen 200 und 400 Hz.

## 3. Die Meßergebnisse

Im folgenden soll über Messungen an vier verschiedenen Germanium-Proben berichtet werden. Die Proben hatten folgende Daten:

- Probe 11: p-Typ, 17 Ohm cm; Obfl. etwa  $4^\circ$  gegen 111-Kristallebene geneigt,
- Probe 12: p-Typ, 34 Ohm cm; Obfl. etwa  $5,5^\circ$  gegen 111-Kristallebene geneigt,
- Probe 13: p-Typ, 40 Ohm cm; Obfl. etwa  $5^\circ$  gegen 111-Kristallebene geneigt,
- Probe 15: n-Typ, 17 Ohm cm; Obfl. etwa  $8^\circ$  gegen 111-Kristallebene geneigt.

<sup>9)</sup> A. R. Hutson, Physic. Rev. **102**, 381 (1956).

An Probe 11 wurde der in der Einleitung genannte Ozoneffekt festgestellt, der es gestattete, wie an Probe 12 und 15 gezeigt wird, das Spektrum der „schnellen“ Terme in reproduzierbarer Weise zu beeinflussen. Dieser Effekt trat an stabilen Obfl. auf, d. h. an Obfl., die nach dem Ätzen Stunden, Tage und auch Wochen an Luft gelagert waren.

### Messungen an Probe 11

An dieser Probe wurde in verschiedenen zusammengesetzten Zyklen der Einfluß von  $O_2$  trocken und feucht,  $N_2$  trocken und feucht und Ozon auf die mit CP 4 geätzte Obfl. untersucht. Die Probe wurde vor der Messung so lange gelagert, bis der Feldeffekt in einem  $O_2$ -trocken-feucht-Zyklus stabil war.

Es ergab sich, daß sich bei Zyklen, die nur  $O_2$  trocken und feucht  $N_2$  trocken und feucht enthielten, die Teilstücke der Obfl.-Leitfähigkeitskurven mit nur geringer Streuung zu einer gemeinsamen Kurve zusammensetzen ließen.

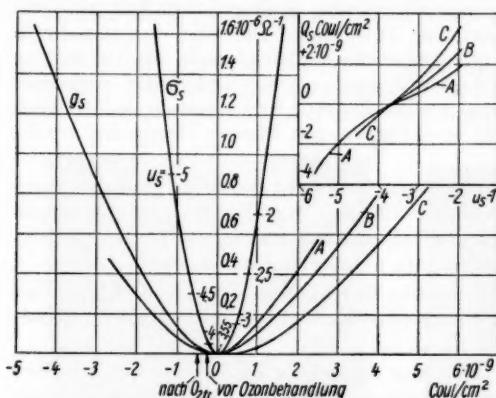


Abb. 4. Ergebnis der Obfl.-Leitfähigkeitsmessungen an Probe 11 und Bestimmung der Ladung in den „schnellen“ Termen

Da durch diese Kurve die „schnellen“ Obfl.-Terme festgelegt sind, finden bei diesen Zyklen keine oder nur geringe chemische Reaktionen statt, die die „schnellen“ Terme beeinflussen.

Anders wird dies, wenn der Zyklus Ozon enthält. Dann findet eine merkbare Änderung der Obfl.-Leitfähigkeitskurve statt. Am deutlichsten wird diese Veränderung bei einem reinen  $O_2$ -trocken-Ozon-Zyklus (Abb. 4). Als Ausgangskurve der nicht mit Ozon behandelten Obfl. ergab sich die Kurve A.

Schaltet man nun im  $O_2$ -trocken-Strom den UV-Strahler ein, dann wird die Obfl.-Leitfähigkeitskurve zusehends flacher und verschiebt sich nach rechts. Im Endzustand nach etwa zwei Minuten erhält man die Kurve C. Nun wird der UV-Strahler wieder ausgeschaltet und die Obfl. der Probe ist von nun an nur trockenem  $O_2$  ausgesetzt. Man bemerkt, daß selbst nach einigen Stunden die Obfl.-Leitfähigkeitskurve nicht auf die Ausgangskurve A zurückgeht, sondern in der Lage der Kurve B verbleibt. Nachdem die Probe dann wieder mehrere Stunden normaler Zimmerluft ausgesetzt wurde, konnte die Ausgangskurve A wieder sehr genau reproduziert werden. Es war lediglich festzustellen, daß der Punkt, an dem die Obfl. neutral ist, ( $\uparrow$ ), etwas nach links verschoben war. Auf Grund dieser Tatsache lag die Vermutung nahe, daß der Einfluß der Feuchtigkeit entscheidend für den Rückgang auf die Ausgangskurve A ist. Die Untersuchung dieses Sachverhaltes wurde an den Proben 12 und 15 durchgeführt.

### Messungen an Probe 15

Zur Untersuchung des an Probe 11 beschriebenen Effektes wurden folgende Messungen durchgeführt: Zuerst wurde die Ausgangskurve *A* der nicht mit Ozon behandelten Obfl. bestimmt (Abb. 5). Dann wurde die Obfl. etwa 2 Minuten ozonhaltiger Atmosphäre ausgesetzt. Hierauf folgte  $O_2$  trocken. Dieser Ozon- $O_2$ -trocken-Zyklus wurde einige Male durchgeführt und zwar so lange, bis an der  $O_2$ -trocken-Kurve keine merkbaren Änderungen mehr auftraten. Die sich dann ergebende  $O_2$ -trocken-Kurve *B* war flacher als die Ausgangskurve, und der Neutralpunkt ( $\uparrow_A$ ) war nach links verschoben ( $\uparrow_B$ ). Das gleichzeitige Flacherwerden der Kurve und Wandern des Neutralpunktes konnte man an den Über-

gangskurven, die zwischen *A* und *B* lagen, deutlich beobachten. Die Kurve *B* blieb in trockener  $O_2$ -Atmosphäre stabil. Während 15–20 Stunden war keine Änderung festzustellen. Wurde die Obfl. dann einige Minuten mit feuchtem  $O_2$  behandelt, dann ergab sich die Kurve *C*, die fast mit der Ausgangskurve übereinstimmte, jedoch war der Neutralpunkt nicht wieder in die alte Lage

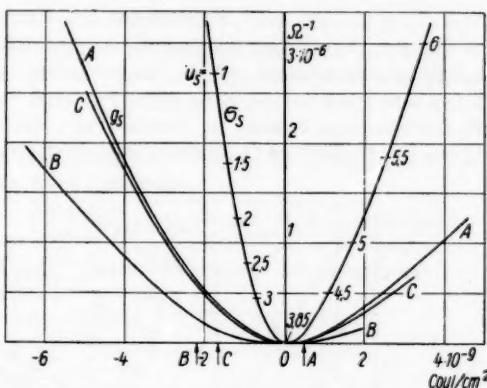


Abb. 5. Ergebnis der Obfl.-Leitfähigkeitsmessungen an Probe 15 im O<sub>3</sub>-trocken-Ozon-Zyklus

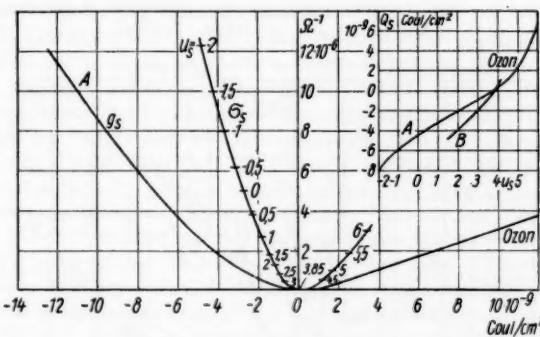


Abb. 6. Gesamtkurve der Obfl.-Leitfähigkeit für Probe 15 und Bestimmung der Ladung in den „schnellen“ Termen

zurückgekehrt ( $\uparrow_c$ ). Nachdem die Obfl. dann etwa 15–20 Stunden der Zimmerluft ausgesetzt war (Meßgefäß geöffnet), ging auch der Neutralpunkt in die Ausgangslage zurück.

Von dieser Probe wurde dann noch die Obfl.-Leitfähigkeit in einem  $O_2$ -trocken-naß- $N_2$ -trocken-naß-Zyklus ohne Ozonvorbehandlung bestimmt, um die Obfl.-Leitfähigkeit für einen größeren Bereich zu erhalten. An diese Kurve wurde dann noch der Ozon-Ast angehängt. Diese Gesamtkurve ist in Abb. 6 gezeigt.

### Messungen an Probe 12

An Probe 12 wurde festgestellt, daß die Verflachung der Obfl.-Leitfähigkeitskurve auch dann eintritt, wenn die  $O_2$ -trocken-Ausgangskurve A sich schon sehr stark auf der Seite der n-Typ-Obfl. befindet (Abb. 7). Durch einen  $O_2$ -trocken-Ozon-Zyklus, in diesem Falle dreimal hintereinander 2 Minuten Ozon, 10–15 Minuten  $O_2$ -trocken, tritt wieder eine Verflachung ein (Kurve B).

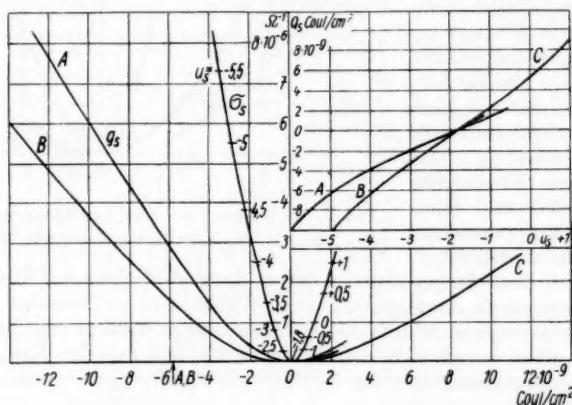


Abb. 7. Ergebnis der Obfl.-Leitfähigkeitsmessungen an Probe 12 und Bestimmung der Ladung in den „schnellen“ Termen

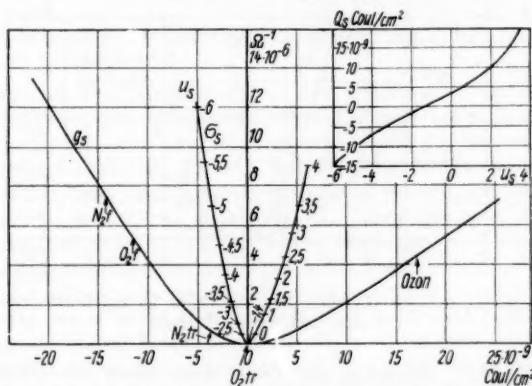


Abb. 8. Ergebnis der Obfl.-Leitfähigkeitsmessungen an Probe 13 und Bestimmung der Ladung in den „schnellen“ Termen

Nach Anwendung einer feuchten Atmosphäre wird diese Wirkung wieder rückgängig gemacht. Eine merkbare Verschiebung des Neutralpunktes trat in diesem Fall nicht auf. Kurve  $C$  in Abb. 7 ist die Ozonkurve.

### Messungen an Probe 13

An Probe 13 traten keine prinzipiell neuen Effekte auf. Es soll davon nur eine möglichst weit ausgesteuerte Obfl.-Leitfähigkeitskurve angegeben werden, um eine weitere Vergleichsmöglichkeit bei der Bestimmung der Obfl.-Terme zu haben (Abb. 8).

#### 4. Bestimmung der Ladung in den „schnellen“ Termen in Abhängigkeit von der Bandverbiegung

Die im voraufgegangenen Abschnitt angegebenen Obfl.-Leitfähigkeitskurven werden nun in folgender von Brown<sup>2)</sup> beschriebenen Weise zur Bestimmung der Ladung in den Obfl.-Termen verwendet. Die gemessene und die berechnete Obfl.-Leitfähigkeitskurven,  $\sigma_s(Q)$  und  $\sigma_s(Q_r)$  —  $Q$  ist die Gesamtladung auf der Obfl.,  $Q_r$  der in der Raumladungsrandsschicht befindliche Teil —, werden so in ein gemeinsames Diagramm eingezeichnet, daß ihre Minima im Koordinatenursprung liegen (Abb. 9).

Da die Obfl.-Leitfähigkeit durch die Verhältnisse in der Raumladungsrandsschicht eindeutig bestimmt ist, gehören die Punkte gleicher Leitfähigkeit auf  $\sigma_s$  und  $g_s$  zur gleichen Bandverbiegung, falls nur noch das Vorzeichen der Bandverbiegung  $u_s$  übereinstimmt, die Punkte also im vorliegenden Diagramm im gleichen Quadranten liegen. Die gesamte auf der Obfl. befindliche Ladung teilt sich auf in die Ladung der Raumladungsrandsschicht  $Q_r$  und den Anteil  $Q_s$ , der sich in den Obfl.-Zuständen befindet. Da im vorliegenden Falle mit einer Frequenz von 200—400 Hz gearbeitet wird, ändert sich nur die Ladung in den „schnellen“ Obfl.-Termen, die Ladung in den „langsam“ Termen bleibt konstant. Trägt man das bei dieser Frequenz gemessene  $g_s$  in das Diagramm ein, so ist das daraus entnommene  $Q_s$  bis auf eine Konstante die Ladung in den „schnellen“ Termen. Bei der Berechnung der Obfl.-Leitfähigkeit  $\sigma_s$  wurde die Streuung der Ladungsträger berücksichtigt<sup>7)</sup>. Die in dieser Weise ausgewerteten Messungen sind in den Abb. 4 bis 8 dargestellt.

Im nächsten Abschnitt wird die Bestimmung der „schnellen“ Obfl.-Terme aus der so erhaltenen Abhängigkeit  $Q_s(u_s)$  vorgenommen.

#### 5. Das Modell für die „schnellen“ Obfl.-Terme

Der Verlauf der  $Q_s(u_s)$ -Kurven legt es nahe, die Beschreibung mit folgendem einfachen Modell zu versuchen: Die „schnellen“ Obfl.-Terme sollen aus einem Akzeptor-Term  $E_a$  mit der Konzentration  $N_a$  pro  $\text{cm}^2$  Obfl. und einem Donator-Term  $E_d$  mit der Konzentration  $N_d$  bestehen (vgl. Abb. 1).

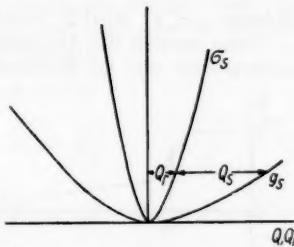


Abb. 9. Bestimmung der Ladung in den Obfl.-Termen

Man sieht, daß durch Änderung der Bandverbiegung  $u_s$  die relative Lage des Fermi-Niveaus zu den Obfl.-Termen und damit deren Besetzung geändert wird. Die Beziehung zwischen  $\zeta_s$  und  $u_s$  ist

$$\frac{1}{kT} \zeta_s = \eta = \varphi - u_s. \quad (1)$$

Die Ladung in den Obfl.-Termen  $Q_s$  wird

$$\frac{1}{e} Q_s = N_d (e^{-(\varepsilon_d - \eta)} + 1)^{-1} - N_a (e^{\varepsilon_a - \eta} + 1)^{-1}, \quad (2)$$

wobei  $\varepsilon_d = E_d/kT$  und  $\varepsilon_a = E_a/kT$  ist. Hieraus entnimmt man, daß

$$\lim_{\eta \rightarrow -\infty} Q_s = Q_{sd} = e N_d \quad \lim_{\eta \rightarrow \infty} Q_s = Q_{sa} = -e N_a. \quad (3)$$

Aus der Kenntnis dieser beiden Grenzwerte kann man also die Konzentration der Terme entnehmen. Da  $Q_s$  aber nur bis auf eine Konstante bekannt ist, ist nur die Differenz der beiden Grenzwerte zugänglich. Es ist

$$Q_{sd} - Q_{sa} = e (N_d + N_a). \quad (4)$$

Solange  $\eta \ll \varepsilon_a$ , wird  $Q_s$  praktisch konstant bleiben. Überstreicht  $\eta$  den Wert  $\varepsilon_a$ , dann werden die Akzeptoren umgeladen. Da sie im unbesetzten Zustand neutral sind, und bei Besetzung negativ geladen werden, wird  $Q_s$  in der Umgebung von  $\varepsilon_a$  um etwa  $e N_a$  abnehmen, falls Akzeptoren und Donatoren nicht zu dicht liegen und die Umladung der Donatoren in diesem Gebiet ohne Einfluß ist. Im Gebiet um  $\varepsilon_d$  wird dann der restliche Abfall um  $e N_d$  stattfinden, und  $Q_s$  für  $\eta \gg \varepsilon_d$  wieder praktisch konstant sein. Man erwartet also einen Verlauf  $Q_s(\eta)$ , wie er schematisch in Abb. 10 gezeigt ist. Der ausgezogene Abschnitt ist der Ausschnitt aus dem Gesamtverlauf, der etwa durch das Experiment erfaßt wird. In dieser Unvollständigkeit liegt natürlich ein Unsicherheitsfaktor bei der Bestimmung der Termdaten. So läßt sich z. B. Gl. (4) nur dahingehend auswerten, daß man eine untere Grenze für die Konzentration der Terme erhält.

Zur Bestimmung der Termdaten wird eine genauere Analyse des Kurvenverlaufs durchgeführt. Hierfür werden noch die beiden ersten Ableitungen von  $Q_s(\eta)$  benötigt:

$$-\frac{4}{e} \frac{dQ_s}{d\eta} = N_d \cosh^{-2} \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_d) + N_a \cosh^{-2} \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_a) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{4}{e} \frac{d^2 Q_s}{d\eta^2} &= N_d \cosh^{-2} \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_d) \tgh \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_d) \\ &+ N_a \cosh^{-2} \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_a) \tgh \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_a). \end{aligned} \quad (6)$$

Man bemerkt, daß

$$Q_s \left( \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_d}{2} + \eta \right) = -Q_s \left( \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_d}{2} - \eta \right) \quad \text{für } N_a = N_d \quad (7)$$

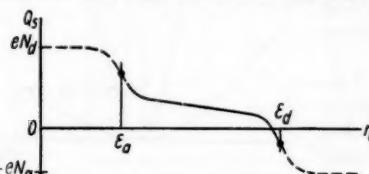


Abb. 10. Schematischer Gesamtverlauf von  $Q_s(\eta)$

gegen  $\varepsilon_a$  um etwa  $e N_a$  abnehmen, falls Akzeptoren und Donatoren nicht zu dicht liegen und die Umladung der Donatoren in diesem Gebiet ohne Einfluß ist. Im Gebiet um  $\varepsilon_d$  wird dann der restliche Abfall um  $e N_d$  stattfinden, und  $Q_s$  für  $\eta \gg \varepsilon_d$  wieder praktisch konstant sein. Man erwartet also einen Verlauf  $Q_s(\eta)$ , wie er schematisch in Abb. 10 gezeigt ist. Der ausgezogene Abschnitt ist der Ausschnitt aus dem Gesamtverlauf, der etwa durch das Experiment erfaßt wird. In dieser Unvollständigkeit liegt natürlich ein Unsicherheitsfaktor bei der Bestimmung der Termdaten. So läßt sich z. B. Gl. (4) nur dahingehend auswerten, daß man eine untere Grenze für die Konzentration der Terme erhält.

Zur Bestimmung der Termdaten wird eine genauere Analyse des Kurvenverlaufs durchgeführt. Hierfür werden noch die beiden ersten Ableitungen von  $Q_s(\eta)$  benötigt:

$$-\frac{4}{e} \frac{dQ_s}{d\eta} = N_d \cosh^{-2} \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_d) + N_a \cosh^{-2} \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_a) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{4}{e} \frac{d^2 Q_s}{d\eta^2} &= N_d \cosh^{-2} \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_d) \tgh \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_d) \\ &+ N_a \cosh^{-2} \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_a) \tgh \frac{1}{2} (\eta - \varepsilon_a). \end{aligned} \quad (6)$$

Man bemerkt, daß

$$Q_s \left( \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_d}{2} + \eta \right) = -Q_s \left( \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_d}{2} - \eta \right) \quad \text{für } N_a = N_d \quad (7)$$

d. h., die Kurve geht durch Spiegelung am Punkt  $(\frac{1}{2}(\varepsilon_a + \varepsilon_d), 0)$  in sich über, falls Akzeptoren- und Donatoren-Konzentrationen einander gleich sind. Umgekehrt kann man auf diese Gleichheit schließen, falls die Kurve eine solche Symmetrie hat. Da die aus den Messungen ermittelten Kurven diese Symmetrie aufweisen, braucht im folgenden nur der Fall  $N_a = N_d$  betrachtet zu werden.

Für die weitere Auswertung ist die Lage der Wendepunkte wichtig. Sie werden nach Gl. (6) wegen  $\frac{d^2 Q_s}{d\eta^2} = 0$  bestimmt aus

$$\cosh^{-2} \frac{1}{2}(\eta - \varepsilon_d) \tgh \frac{1}{2}(\eta - \varepsilon_d) + \cosh^{-2} \frac{1}{2}(\eta - \varepsilon_a) \tgh \frac{1}{2}(\eta - \varepsilon_a) = 0. \quad (8)$$

$\frac{d^2 Q_s}{d\eta^2}$  hat als Funktion von  $\eta$  für  $\varepsilon_d - \varepsilon_a \leq 2,634$  eine Nullstelle, für  $\varepsilon_d - \varepsilon_a > 2,634$  stets drei Nullstellen. Aus Abb. 10 und den  $Q_s(u_s)$ -Kurven der Abb. 4 bis 8 geht hervor, daß im vorliegenden Falle stets drei Wendepunkte auftreten, also bestimmt  $\varepsilon_d - \varepsilon_a > 2,634$  ist. Ist  $\varepsilon_d - \varepsilon_a$  sehr groß, so entnimmt man Gl. (8), daß die beiden äußeren Wendepunkte praktisch bei  $\eta = \varepsilon_a$ ,  $\varepsilon_d$  liegen. Aus den oben angeführten Symmetriegründen liegt der dritte Wendepunkt dann bei  $\eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_a + \varepsilon_d)$ . Diese Situation ist bei den aus den Messungen hervorgegangenen  $Q(\eta)$ -Kurven gegeben.

Die Steigung in den Wendepunkten wird nach Gl. (5)

$$-\frac{4}{e} \frac{dQ_s}{d\eta} = N_d \quad \text{für } \eta = \varepsilon_a, \varepsilon_d \quad \varepsilon_d \gg \varepsilon_a \quad N_a = N_d \quad (9)$$

$$-\frac{4}{e} \frac{dQ_s}{d\eta} = 2 N_d \cosh^{-2} \frac{1}{2}(\varepsilon_d - \varepsilon_a) \quad \text{für } \eta = \frac{1}{2}(\varepsilon_a + \varepsilon_d) \quad N_a = N_d. \quad (10)$$

Aus Gl. (9) kann man also in guter Näherung die Konzentration der diskreten Terme ermitteln. Es liegt allerdings hier wieder die Schwierigkeit vor, daß die Wendepunkte experimentell noch nicht erfaßt wurden. Man kann also Lage und Konzentration der diskreten Terme nur abschätzen (vgl. die entsprechende Situation bei<sup>10)</sup>).

Nun kommt man aber zur Erklärung der gefundenen  $Q_s(\eta)$ -Kurven nicht mit zwei diskreten Termen aus. Nach Gl. (10) ergibt sich eine Steigung am mittleren Wendepunkt, die gegenüber dem Wert aus den Messungen viel zu klein ist. Es müssen also noch zusätzlich Terme vorhanden sein. Der Verlauf um den mittleren Wendepunkt herum kann befriedigend wiedergegeben werden, wenn man eine stetige Verteilung mit konstanter Termdichte den zwei diskreten Termen überlagert. Wenn man die Steigung, die von den diskreten Termen herrührt, am mittleren Wendepunkt vernachlässigen kann, dann ergibt sich die Termdichte der stetigen Verteilung  $N_s$  aus dem Wert der Steigung an diesem Wendepunkt zu

$$-\frac{1}{e k T} \frac{dQ_s}{d\eta} = N_s. \quad (11)$$

$N_s$  hat die Dimension  $\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$ .

<sup>10)</sup> W. L. Brown, H. C. Montgomery, Physic. Rev. **103**, 865 (1956).

### 6. Bestimmung der Termdaten und Diskussion der Ergebnisse

Mit Hilfe der im vorigen Abschnitt gewonnenen Formeln kann nun das Spektrum der „schnellen“ Terme bestimmt werden. Das Ergebnis ist in Tab. 1 wiedergegeben.

Tabelle 1  
Auf Grund der Messungen ermittelte Termdaten

	$N_s \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$	$\frac{1}{2} (\varepsilon_a + \varepsilon_d)$	$\varepsilon_d - \varepsilon_a$	$N_d \text{ cm}^{-2}$
Probe 11: A	$2,4 \cdot 10^{11}$	0,8	$> 6$	$> 8,5 \cdot 10^{10}$
	$3,4 \cdot 10^{11}$			
Probe 12: A	$4,3 \cdot 10^{11}$	0,8	$\approx 8$	$\approx 1,2 \cdot 10^{11}$
	$6,0 \cdot 10^{11}$			
Probe 13:	$6,2 \cdot 10^{11}$	0,6	$\approx 9$	$\approx 1,1 \cdot 10^{11}$
Probe 15: A	$3,1 \cdot 10^{11}$	0,0	$> 7$	$> 7,5 \cdot 10^{10}$
	$4,5 \cdot 10^{11}$			

Betrachtet man zunächst die stetige Verteilung, so fällt auf, daß die Termdichte von allen Proben in derselben Größenordnung liegt. Im Mittel ergibt sich für die nicht mit Ozon behandelte CP 4-geätzte Obfl. (Fall A) eine Dichte von  $N_s = 4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ . Das Verhältnis der Konzentration nach Ozonbehandlung (Fall B) zu der Konzentration vor Ozonbehandlung (Fall A) ist bei allen Proben recht genau 1,4. Diese Tatsachen weisen darauf hin, daß bei allen Proben die gleiche Art der Obfl.-Terme vorliegt und, da die Proben in ihrem Leitfähigkeitscharakter recht unterschiedlich sind, die Volumendaten keinen Einfluß auf die Obfl.-Terme haben.

Auch bei den diskreten Termen fällt es auf, daß sie in ihren Daten im wesentlichen übereinstimmen. Aus diesen Daten entnimmt man, daß bei Probe 12 und 13 etwa die Wendepunkte gerade erfaßt wurden oder nicht weitab liegen, während bei Probe 11 und 15 die Wendepunkte noch etwas weiter außerhalb liegen. Sehr viel weiter auseinander als bei Probe 12 und 13 können die Wendepunkte aber nicht liegen, da sich sonst in dem gemessenen Bereich noch keine Krümmung in der  $Q_s(\eta)$ -Kurve bemerkbar machen dürfte. Nimmt man nun extrapoliert an, daß die Wendepunkte für die Proben 11 und 15 an den gleichen Stellen liegen, wie für die Proben 12 und 13, dann muß, um die gemessenen Kurven zu erklären,  $N_d$  auf einen Wert erhöht werden, der recht gut mit den  $N_d$ -Werten für Probe 12 und 13 übereinstimmt. Die Messungen können also an allen Proben mit dem gleichen diskreten Spektrum erklärt werden. Dieses Spektrum wird gegeben durch

$$\frac{1}{2} (\varepsilon_a + \varepsilon_d) = 0,55 \quad \varepsilon_d - \varepsilon_a = 8,5 \quad N_d = N_a = 1,2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}.$$

Während beim kontinuierlichen Teil des Spektrums eine gewisse Streuung in den  $N_s$ -Werten auftritt, ändert sich das diskrete Spektrum von Probe zu Probe nicht merklich. Über die Änderung des diskreten Spektrums durch die Ozonbehandlung ließ sich keine nähere Aussage machen, da die gemessenen Kurven einen zu kleinen Abschnitt in der Umgebung des mittleren Wendepunktes lieferten. Nur soviel ließ sich sagen, daß durch die Ozonbehandlung

sicher keine zusätzlichen diskreten Terme erzeugt wurden, die näher am mittleren Wendepunkt liegen.

Dann ist noch die Verschiebung des Neutralpunktes ( $\uparrow_A$  nach  $\uparrow_B$  in Abb. 5) zu beachten. Diese Verschiebung gibt an, um welchen Betrag sich die Ladung in den „langsam“ Obfl.-Termen geändert hat. Eine solche Ladungsänderung kann zwei Ursachen haben; einmal eine Lageänderung des Fermi-Niveaus, zum andern eine Änderung der Termdichte. Die Annahme, daß es sich um eine bloße Lageänderung des Fermi-Niveaus handelt, führt aber zu einem Widerspruch. Hat sich nämlich auf Grund der Änderung der Termdichte der „schnellen“ Terme im Fall der neutralen Obfl. das Fermi-Niveau relativ zu den „langsam“ Termen verschoben, so müßte es und damit die Ladung in den „langsam“ Termen auf den Ausgangswert ( $\uparrow_A$ ) zurückgehen, sobald die Termdichte der „schnellen“ Terme auf den Ausgangswert zurückgeht. Dies geschieht aber nicht, wie man an Hand der Lage von ( $\uparrow_C$ ) in Abb. 5 feststellt. Es liegt also hier eine Änderung der Termdichte der „langsam“ Terme vor, die durch Ozon bewirkt wird.

Die Ladungsänderung ist bei Probe 15 (Abb. 5)  $2,6 \cdot 10^{-9}$  Coul/cm<sup>2</sup>. Es sind also  $1,6 \cdot 10^{10}$  Bindungen pro cm<sup>2</sup> aufgelöst worden, die vorher mit Elektronen besetzt waren.

Bei den Messungen an Probe 12 brachte die Einwirkung von Ozon keine merkliche Verschiebung des Neutralpunktes mehr mit sich (Abb. 7). Die Ladung in den „langsam“ Obfl.-Termen hat sich bei dieser Probe also nicht geändert; es sind keine Bindungen „langsam“ Terme aufgelöst worden. Die Ausgangskurve stellt aber hier bereits den Zustand einer ozonbehandelten Obfl. dar, deren Vergrößerung der Anzahl der „schnellen“ Terme bereits wieder durch Feuchtigkeit rückgängig gemacht worden ist. Der Ausgangszustand bei dieser Probe ist also vergleichbar mit dem bei Probe 15 durch die Kurve C dargestellten Zustand. Der Neutralpunkt  $\uparrow_A$  der Ausgangskurve A ist etwa um  $6 \cdot 10^{-9}$  Coul/cm<sup>2</sup> gegenüber dem Neutralpunkt bei nicht mit Ozon behandelter Obfl. verschoben.

Die dargestellten Ergebnisse lassen sich unter Zuhilfenahme folgender Vorstellungen beschreiben. Bei Probe 15 (Abb. 5, 6) wird durch die Einwirkung von Ozon eine gewisse Anzahl von Bindungen der „langsam“ Terme mit Akzeptorcharakter gelöst. Diese „langsam“ Terme kann man sich durch Adsorption von Sauerstoff entstanden denken, etwa in der in Abb. 11b gezeigten Weise.

Nimmt man an, daß diese Terme alle die gleiche energetische Lage haben, dann geht, wegen ihrer großen Anzahl, das Fermi-Niveau durch sie hindurch. Die Terme sind also damit nur zur Hälfte besetzt. Da, wie

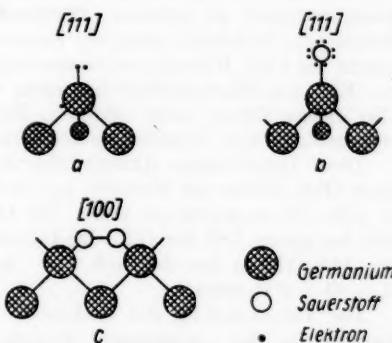


Abb. 11. In Sauerstoffatmosphäre auftretende Bindungstypen an der Obfl.<sup>4)</sup>, Ref. Handl. a) Freie Valenz als Akzeptor; b) Akzeptortyp der Sauerstoffadsorption; c)  $\text{GeO}_2^-$  Bindung

oben abgeschätzt, sich  $1,6 \cdot 10^{10}$  besetzte Bindungen pro  $\text{cm}^2$  lösen, werden sich also insgesamt  $3,2 \cdot 10^{10}$  Bindungen pro  $\text{cm}^2$  lösen. Ist es nun möglich, daß diese Terme sich in die zusätzlich auftretenden „schnellen“ Terme verwandelt haben? Die positive Beantwortung dieser Frage hängt davon ab, ob der Bereich  $\delta E$ , über den sich die stetige Verteilung um den mittleren Wendepunkt herum erstreckt, groß genug ist.  $\delta E$  darf nicht wesentlich kleiner sein als die Energiedifferenz, die sich aus dem Abstand der beiden äußeren Wendepunkte ergibt, da sich sonst die Steigung der  $Q_s(\eta)$ -Kurven in dem Bereich außerhalb der stetigen Verteilung als zu klein ergeben würde.

Die Konzentrationsänderung der „schnellen“ Terme bei Probe 15 ist nach Tab. 1:  $1,4 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ . Soll die Änderung ihrer Gesamtzahl gleich der Anzahl der gelösten Bindungen werden, dann muß sich die stetige Verteilung über den Bereich  $\delta E$  erstrecken, der sich aus  $1,4 \cdot 10^{11} \cdot \delta E = 3,2 \cdot 10^{10}$  zu  $\delta E = 0,228 \text{ eV} = 9 \text{ kT}$  ergibt. Auch bei Probe 12 wird man für die Lage des Neutralpunktes die gleiche Reaktion verantwortlich machen. Mit den für diese Probe geltenden Daten ergibt sich die Ausdehnung der stetigen Verteilung zu  $\delta E = 0,2 \text{ eV} = 8 \text{ kT}$ . Die sich auf diese Weise ergebenden  $\delta E$ -Werte sind mit den Messungen durchaus vereinbar.

Da die Anzahl der „schnellen“ Terme von allen Autoren für die gleiche Obfl.-Behandlung in der gleichen Größenordnung angegeben wird und bei Atmosphärenwechsel auch keine Änderung um eine Größenordnung oder mehr eintritt, ist für ihr Entstehen eine Ursache verantwortlich, die unabhängig von leicht desorbierbaren Adsorbenten ist<sup>4)</sup>, Ref. Garrett u. a. Solche Ursachen sind Gitterbaufehler, Ecken, Kanten. Die Vermutung, daß diese Obfl.-Eigenschaften die „schnellen“ Terme bestimmen, wird weiter begünstigt dadurch, daß beim Schmiegeln eine Obfl.-Vergrößerung entsteht, die bei weitem nicht ausreicht, die Vergrößerung der Obfl.-Rekombinationsgeschwindigkeit zu erklären. Während die Vergrößerung der Obfl. durch Schmiegeln höchstens etwa den Faktor 10 ausmachen kann (vgl. Abschn. 1), nimmt die Obfl.-Rekombinationsgeschwindigkeit um den Faktor 100 bis 1000 zu. Eine dem Flächeninhalt der realen Obfl. proportionale Termdichte kann also diesen Effekt nicht erklären. Die Vermutung, daß Ecken und Kanten entscheidend zur Vermehrung der Terme beitragen, ist also naheliegend.

Diese Terme zeigen Akzeptorcharakter, indem sie an einer freien Valenz eines Obfl.-Atoms ein Elektron aus dem Innern binden können, etwa in der in Abb. 11a angegebenen Weise. Die Ozonbehandlung der Probe 15 bewirkt also bei einem Teil der Obfl.-Bindungen die Verwandlung des Bindungstyps der Abb. 11b in den der Abb. 11a. An der Obfl. findet also die Reaktion  $\text{O}_3 + \text{O} \rightarrow 2 \text{O}_2$  statt.

Die Verminderung der „schnellen“ Terme ohne wesentliche Ladungsänderung in den „langsam“ Termen durch die Einwirkung der feuchten Atmosphäre läßt sich folgendermaßen erklären: Die aufgelöste Bindung muß einen neutralen Term ergeben. Eine solche Möglichkeit bietet die Adsorption von Sauerstoff in der in Abb. 11c angegebenen Weise als  $\text{GeO}_2$ . Die freien Valenzen der Obfl.-Atome werden dabei so gebunden, daß pro adsorbiertes Sauerstoffatom ein Obfl.-Zustand beseitigt wird.

Diese Terme sind sehr stabil, wie man daran erkennt, daß der Neutralpunkt  $\uparrow_c$  nicht ohne weiteres auf den Ausgangswert  $\uparrow_a$  zurückgeht. Mehrfache Behandlung in feuchter Atmosphäre (>95% relative Feuchte für

10—20 Minuten) änderte die Lage des Neutralpunktes nicht. In trockener Sauerstoffatmosphäre war während der Dauer von 20 Stunden auch keine Änderung zu bemerken. Ein Rückgang zum Ausgangs-Neutralpunkt  $\uparrow_A$  erfolgte, wenn die Probe etwa 15 Stunden der Normalatmosphäre (Zimmerluft) bei geöffnetem Meßgerät ausgesetzt war.

Dieses Verhalten — Bildung des Zustandes innerhalb einiger Minuten und dann eine relative Stabilität — ist ein Merkmal der  $\text{GeO}_2$ -Bindung, das von Dillon bemerkt und von Handler<sup>4)</sup> zitiert wird und für das Vorliegen dieses Bindungstyps spricht.  $\text{H}_2\text{O}$  wirkt bei dieser Reaktion als Katalysator.

Die Entstehung „schneller“ Terme durch die Ozonbehandlung bei Probe 12 ohne gleichzeitige Änderung der Ladung in den „langsam“ Termen wird man nach dem Vorangegangenen nun so verstehen, daß die  $\text{GeO}_2$ -Bindung durch Ozon gelöst und in die „schnelle“ Akzeptorbindung der Abb. 11a überführt wird.

Herrn Prof. Dr. O. Hachenberg danke ich für die Förderung der Arbeit.

Berlin-Adlershof, Heinrich-Hertz-Institut der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin.

Bei der Redaktion eingegangen am 22. Januar 1959.

**Berichtigung zur Arbeit:**  
**„Die Depolarisation der Natrium-Resonanzfluoreszenz“**  
*Ann. Physik (7) 2, 393 (1959)*

Von W. Ermisch und R. Seiwert

Bei der Ermittlung der Teilchendichte  $N$  der Natrium-Atome mit Hilfe der Formel  $N(T) = p(T)/kT$  sind, wie sich bei weiteren Berechnungen zum Thema der Arbeit herausgestellt hat, im Nenner  $T$ -Werte aus der falschen Spalte des Rechenschemas eingesetzt worden. Um den dadurch entstandenen Fehler zu korrigieren, muß man sämtliche  $N$ -Werte in den Abb. 1 bis 3 mit dem Faktor  $T^{\circ}\text{C}/T^{\circ}\text{K}$  multiplizieren. Dementsprechend ändern sich die Maßzahlen der unteren Skala der Abb. 1 und 2, und die Linearität des Maßstabes geht verloren, was hier jedoch ohne Bedeutung ist. In Abb. 3 ist die Teilchendichte als Parameter der Meßkurven angegeben. Entsprechend der erforderlichen Korrektur muß es heißen

statt $1 \cdot 10^{10}$	$2,73 \cdot 10^9$	statt $8 \cdot 10^{11}$	$2,99 \cdot 10^{11}$
statt $1 \cdot 10^{11}$	$3,20 \cdot 10^{10}$	statt $1 \cdot 10^{12}$	$3,79 \cdot 10^{11}$
statt $2 \cdot 10^{11}$	$6,81 \cdot 10^{10}$	statt $2 \cdot 10^{12}$	$7,90 \cdot 10^{11}$
statt $4 \cdot 10^{11}$	$1,43 \cdot 10^{11}$	statt $4 \cdot 10^{12}$	$1,65 \cdot 10^{12}$
statt $6 \cdot 10^{11}$	$2,20 \cdot 10^{11}$	statt $6 \cdot 10^{12}$	$2,53 \cdot 10^{12}$

An der Deutung des Verlaufs der Meßkurven und den Folgerungen aus dem Meßresultat ändert sich durch die Berichtigung der  $N$ -Werte nichts.

Berlin, II. Physikalisches Institut der Humboldt-Universität und Institut für Optik und Spektroskopie der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin.

Bei der Redaktion eingegangen am 26. Februar 1959.

---

Verantwortlich

für die Schriftleitung: Prof. Dr. G. Richter, Zeuthen-Miersdorf, Platanenallee 6; für den Anzeigen-  
teil: DEWAG-Werbung, Filiale Leipzig, Leipzig C 1, Friedrich-Ebert-Str. 110, Ruf 7851. Z. Z.  
gilt Anzeigenpreisliste 4. Verlag: Johann Ambrosius Barth, Leipzig C 1, Salomonstr. 18B,  
Fernruf: 27681, 27682. ZLN 5066

Printed in Germany

Druck: Paul Dünnhaupt, Köthen (IV/5/1) L 127/59



## Lexikon der Kern- und Reaktorteknik

Herausgegeben von K. H. HÖCKER und K. WEIMER

Zwei Bände Hütte-Format,  
zusammen 1685 Seiten mit 310 Abbildungen und Tabellen  
In Leinen gebunden DM 125.—

Dieses Lexikon faßt zum ersten Male auf der Welt die Atomwissenschaft enzyklopädisch zusammen. Bei der Definition und Erläuterung der 3000 Stichworte sind die Ergebnisse der 2. Genfer Atomkonferenz „Atome für den Frieden“ berücksichtigt.

Eine sehr ausführliche Isotopentabelle gibt der Forschung und Industrie die notwendigen Daten (Wirkungsquerschnitte, Halbwertzeiten usw.). Der umfangreiche Tabellenteil ist zweckmäßig für die praktische Arbeit zusammengestellt und enthält Zahlen, die im allgemeinen nur nach mühsamer Kleinarbeit zugänglich sind.

Die bereits arbeitenden und auch die geplanten Reaktoren aller Länder sind hier zum ersten Male tabellarisch zusammengefaßt und nach Aufbau, Arbeitsweise und Leistung aufgeschlüsselt. Rasches Auswerten der internationalen Fachliteratur gewährleisten die englischen und französischen Fachbezeichnungen nach jedem Stichwort und das englisch-französisch-deutsche Vokabular.

In der Deutschen Demokratischen Republik beziehbar im Rahmen des Kontingents

FRANCKH'SCHE VERLAGSHANDLUNG STUTTGART

### Quantentheorie des Atoms

Von Prof. Dr. A. RUBINOWICZ, Warschau

Übersetzung nach der 2. polnischen Auflage des Werkes „Kwantowa Teoria Atomu“. VII, 486 Seiten mit 38 Abb. im Text 1959. Gr. 8°.  
DM 29.80, Leinen DM 31.80

Dieses Lehrbuch ist aus langjährigen Vorlesungen hervorgegangen. Im ersten Teil des Buches wird die Entwicklung der älteren Quantentheorie dargestellt. Im zweiten Teil werden die Grundlagen und Anwendungen der neuen Quantentheorie gebracht. Dem Kapitel II ist ein mathematischer Anhang beigegeben, der die Sommerfeldsche Polynommethode zur Lösung der Eigenwertprobleme der Quantentheorie in ihrer allgemeinen Fassung darstellt. Außerdem enthält sie einige spezielle im Buchtext nicht berücksichtigte Tatsachen und Überlegungen.

JOHANN AMBROSIUS BARTH / VERLAG / LEIPZIG

## Einführung in die Theorie der Elektronenoptik

Von Dr. phil. JOHANNES PICHT

o. Prof. für theoretische Physik und Optik, Pädagogische Hochschule Potsdam-Sanssouci  
(früher Tech. Hochschule Berlin-Charlottenburg)

2., erweiterte Auflage

VIII, 274 Seiten mit 70 Abbildungen im Text. 1957. Gr. 8°

DM 29.20, Leinen DM 31.—

Über die erste im Jahre 1939 erschienene Auflage des Buches schrieb Professor Dr. Brüche in der „Elektrotechnischen Zeitschrift“:

„Eine mit großer Sachkenntnis geschriebene Einführung in die Theorie, die durch ihr hohes Niveau und durch die klare Darstellung dem Theoretiker ein schnelles und tiefes Eindringen in die Grundlagen und den mathematischen Apparat der geometrischen Elektronenoptik ermöglicht. Das Buch kann jedem, der sich ernstlich mit der Elektronenoptik befassen will, aufs wärmste empfohlen werden.“

Die neue Auflage ist auf den neuesten Stand der Wissenschaft gebracht worden, wodurch sich eine Erweiterung des Umfangs ergab. Der Verfasser war bemüht, den Charakter einer Einführung in das Gebiet zu wahren, insbesondere die mathematischen und gedanklichen Überlegungen soweit durchzuführen, wie dies zum ausreichenden Verständnis der theoretischen Zusammenhänge erforderlich schien.

## Arbeitstagung Festkörperphysik II

vom 8. bis 11. April 1954 in Dresden

Redaktion Dr. K. W. Böer, Berlin

219 Seiten mit 205 Abbildungen im Text. 1955. Gr. 8°, DM 21.—

**Neue Hütte:** Der dargebotene Stoff hat keineswegs nur für den theoretischen Physiker oder Physiko-Chemiker, sondern auch für den physikalisch-chemisch orientierten Metallkundler besonderes Interesse. Man kann sagen, daß die Niederschrift der Tagungsberichte in Buchform sehr wertvoll ist, da sich in den Vorträgen eine große Zahl fruchtbare Gedanken und Ansätze zur Theoriebildung zeigt. Die Beiträge sind von hohem wissenschaftlichen Niveau.

Thümmler

## Klassische Arbeiten deutscher Physiker

Herausgegeben von der Physikalischen Gesellschaft in der  
Deutschen Demokratischen Republik

Heft 1: W. C. RÖNTGEN, *Grundlegende Abhandlungen über die X-Strahlen*

44 Seiten und 1 Porträt. 1954. Gr. 8°. DM 2.70

**Die Technik:** Es ist sehr zu begrüßen, daß die Originalarbeiten Röntgens über seine Entdeckung der X-Strahlen neu herausgegeben worden sind. Das Studium der kleinen Schrift führt uns die Größe der Entdeckung Röntgens vor Augen und zeigt, daß er dank seiner Gründlichkeit bereits die wichtigsten Eigenschaften der X-Strahlen feststellen konnte. Das Studium der Abhandlungen kann sehr empfohlen werden.

Freyer

Heft 2: W. FRIEDRICH, P. KNIPPING, M. v. LAUE, *Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen*

36 Seiten mit 3 Abb. im Text und 4 Tafeln. 1955. Gr. 8°. DM 3.—

**Röntgen- und Laboratoriumspraxis:** Nachdem im ersten Heft die grundlegenden Arbeiten Röntgens abgedruckt worden waren, folgt jetzt im zweiten Heft der Serie die originalgetreue Wiedergabe der Veröffentlichung von Laue, Friedrich und Knipping aus dem Jahrgang 1913 der „Annalen der Physik“ über Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen. Es ist außerordentlich reizvoll, den grundlegenden theoretischen Ausführungen zu folgen, die Laue über die vermutliche Wellennatur der Röntgenstrahlen und die Möglichkeit, sie mit Hilfe von Interferenzerscheinungen an dem regelmäßigen Raumgitter von Kristallen zu beweisen, in dieser Arbeit gemacht hat.

Gj.

JOHANN AMBROSIUS BARTH / VERLAG / LEIPZIG

8367

k

uci

che

ih  
nd  
ne  
nit

rech  
ter  
ge-  
nis

ker  
all-  
ate  
Ge-  
en-  
eler

en

ne  
en  
nk  
en  
ver

en

en  
die  
us  
n-  
en  
g-  
on  
3j.

G